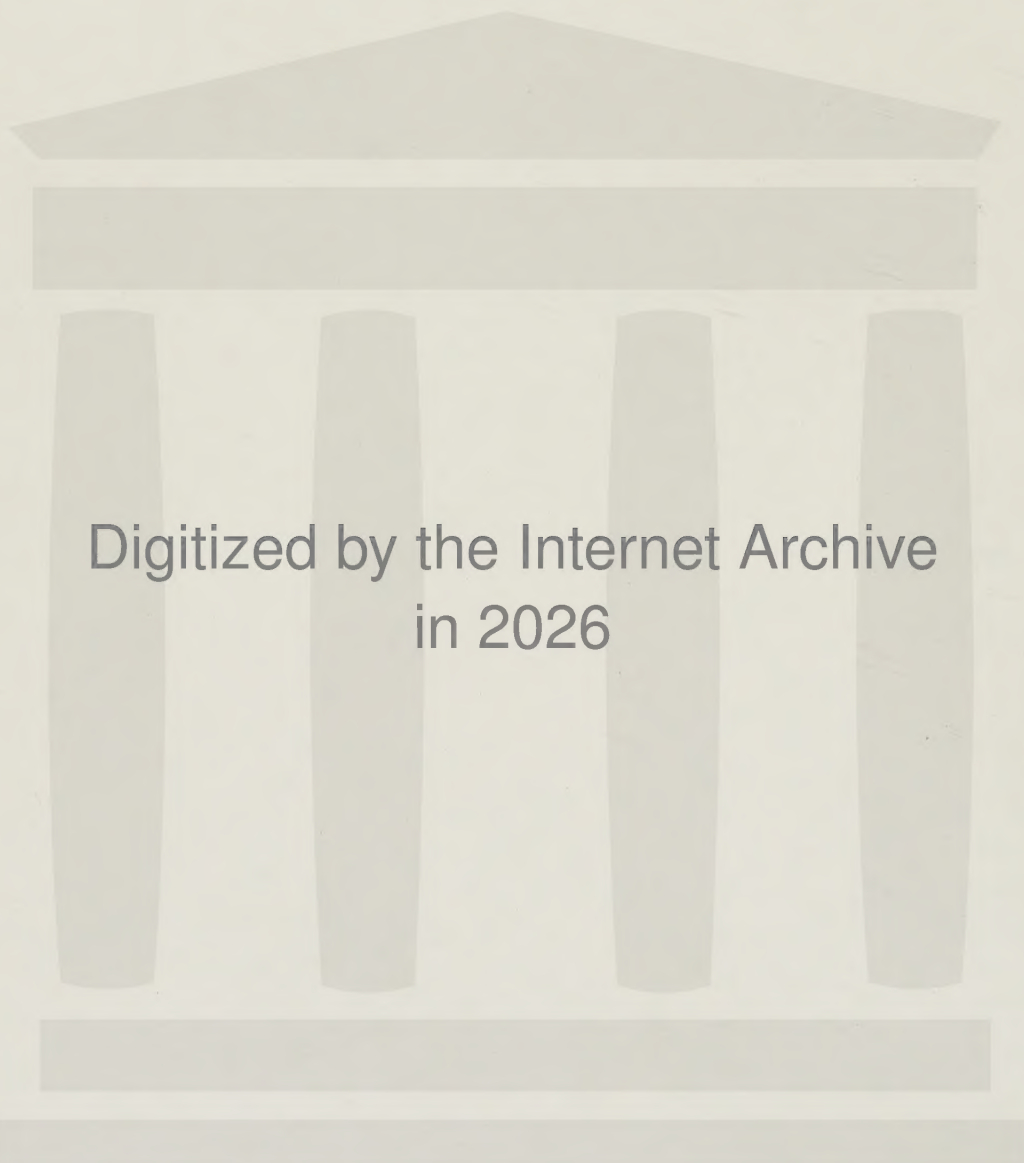


W. Betz

Frankfurt a. M. 1980



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41550820_0018

ELEKTRONEN IN SUPERSCHWEREN

QUASIMOLEKÜLEN

Inaugural - Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades

der Naturwissenschaften

beim Fachbereich Physik

der Johann-Wolfgang-Goethe-Universität

zu

Frankfurt am Main

von

Wilfried Betz

aus Hanau

Frankfurt am Main

1980



Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereichs Physik
der Johann-Wolfgang-Goethe-Universität zu
Frankfurt am Main

Dekan: Prof. Dr. W. Martienssen

Leiter der Arbeit: Prof. Dr. W. Greiner

Erstgutachter: Prof. Dr. W. Greiner

Zweitgutachter: Prof. Dr. B. Müller

Tag der mündlichen Prüfung: **12.9.80**

Abstract

The solutions of the two-centre Dirac equation in the one-electron approximation for symmetric and asymmetric quasimolecules are presented. The energy levels of the bound states are calculated in the field of two point-like nuclei as well as in the field of two extended nuclei. We discuss the correlation diagrams of the symmetric quasimolecules Pb-Pb and Nb-Nb and of the asymmetric Pb-Cm, U-Cm, Pb-Cf and U-Cf systems. We analyze the phase of the wavefunctions in the region of avoided crossings, the charge density distribution of the electron in symmetric and asymmetric two centre systems and the radial components of the quasimolecular wavefunctions in their dependence of the two centre distance.

The radial and rotational matrix elements, which we have calculated for the Pb-Cm, U-Cm, Pb-Pb and Nb-Nb systems are the basis for the theoretical calculations of the inner-shell ionisation, the quasimolecular x-rays, the anisotropy, the δ -electrons and the positron creation in collisions of very heavy ions.

Finally we show how to solve the two centre Dirac equation for many electron systems using the Hartree-method.

Inhaltsverzeichnis

	<u>Seite</u>
I. Einleitung	1
II. Lösung der Zweizentrendiracgleichung für die gebundenen Zustände	14
1. Multipolentwicklung der Wellenfunktion	15
2. Die Startkoeffizienten	20
3. Unterscheidung der gebundenen Zustände mit positiver bzw. negativer magnetischer Quantenzahl	28
4. Das Zweizentrenpotential	31
a. Potential zweier Punktkerne	32
b. Potential zweier ausgedehnter Kerne	38
III. Energieniveaus der gebundenen Zustände in superschweren Quasimolekülen	42
1. Quantenzahl des Zweizentrensystems	43
2. Die verbotenen Kreuzungen	46
3. Klassifikation adiabatischer Zustände	50
4. Phasenbestimmung molekularer Wellenfunktionen	54
IV. Diskussion der Korrelationsdiagramme	56
1. Symmetrische Zweizentrensysteme	57
2. Die asymmetrischen Zweizentrensysteme	67
3. Der Eintauchpunkt überkritischer Quasimoleküle	84
4. Die Monopolnäherung	88
V. Dichteverteilung der Elektronen in Quasimolekülen	91
1. Der Formalismus	91
2. Asymmetrische Zweizentrensysteme	99
3. Die symmetrischen Zweizentrensysteme	107

VI. Radiale Komponenten der quasimolekularen Wellenfunktionen	112
VII. Kopplungsmechanismen in quasimolekularen Stößen von sehr schweren Ionen	123
1. Die radialen Matrixelemente	125
a. Die radialen Matrixelemente der Quasimoleküle für Punktkerne	125
b. Die radialen Matrixelemente der Quasimoleküle für ausgedehnte Kerne	131
c. Der Einfluß der Translationsfaktoren auf die radialen Matrixelemente	136
d. Diskussion ausgewählter Ergebnisse	142
e. Die radialen Matrixelemente in der Monopolapproximation	197
2. Die Rotationsmatrixelemente der Quasi- moleküle	203
3. Vergleich der beiden Kopplungsarten	237
VIII. Die Zweizentrendiracgleichung für Vielelek- tronensysteme	245
1. Das Hartree-Verfahren	247
2. Die Entwicklung des mittleren Potentials nach Multipolen	250
IX. Zusammenfassung und Ausblick	256
Literaturverzeichnis	259
Lebenslauf	
Danksagung	

I. Einleitung

In der vorliegenden Arbeit wollen wir das Verhalten der Elektronen in starken elektrischen Feldern mit Hilfe der kurzlebigen superschweren Quasimoleküle (Lebensdauer ca. 10^{-19} sec) studieren. Hierbei gehen wir von der Lösung der stationären Zweizentrendiracgleichung für Ein-elektronensysteme aus, die zur theoretischen Beschreibung der MO-x-rays, Anisotropie der MO-Strahlung, K-, L-Locherzeugung, δ -Elektronen und Positron-Elektron-Paarerzeugung in Schwerionenstößen benötigt wird. Ziel dieser Arbeit ist ein systematisches Studium der Lösungen der Zweizentrendiracgleichung für symmetrische und asymmetrische Systeme. Die für die dynamischen Rechnungen der in Quasimolekülen ablaufenden Prozesse erforderlichen Matrixelemente werden untersucht. Im Rahmen dieser Arbeit wurde sowohl das Lösungsverfahren der Zweizentrendiracgleichung auf asymmetrische Systeme erweitert und der Einfluß der Kernaussdehnung berücksichtigt, als auch verbesserte Integrationsverfahren zur Berechnung der Matrixelemente verwendet.

Die synthetische Erzeugung der Transurane hat zu einer Erweiterung des Periodensystems der Elemente geführt¹. Da die experimentell ermittelten Zerfallszeiten zu großen Ladungszahlen hin immer kleiner werden, sind die theore-

tischen Vorhersagen stabiler superschwerer Kerne um $Z = 114$ bzw. $Z = 164$ sehr aufregend². Die berechneten Lebensdauern der stabilen oder quasistabilen Inseln der superschweren Kerne schwanken je nach den betrachteten Isotopen zwischen einem und tausend Jahren². Bisher jedoch konnten weder in der Natur noch in Schwerionenstößen Elemente dieser stabilen Inseln beobachtet werden³. Von diesen superschweren Elementen werden elektrische Feldstärken ($E=10^{19}$ V/cm) erzeugt, die die Elektronen immer näher an den Kern binden.

Erhöhen wir durch ein Gedankenexperiment die Kernladungszahl der zur Zeit sich am Ende des bekannten Periodensystems befindenden Atome mit $Z = 107$, so bricht das Lösungsspektrum der Diracgleichung für ein Elektron im Coulombfeld eines punktförmigen Kernes bei der Ladung $Z = 1/\alpha \sim 137$ für alle gebundenen Zustände mit $j = 1/2$ ab (Bild 1). Berücksichtigen wir jedoch die endliche Kernausdehnung, so erreicht der $1s \pm 1/2$ Zustand bei einer kritischen Ladung von $Z_{kr} \sim 170$ das negative Kontinuum⁴. Die Bindungsenergie des $1s \pm 1/2$ Zustandes entspricht der zweifachen Elektronenmasse $E_{1s \pm 1/2} = -2m_e c^2 \sim 1022$ keV. Erhöhen wir die Kernladungszahl Z über den kritischen Wert von 170 hinaus, so taucht der Elektronenzustand in das negative Kontinuum ein⁴ (Bild 1). Falls die K-Schale vorher nicht voll besetzt war, kommt es zur spontanen

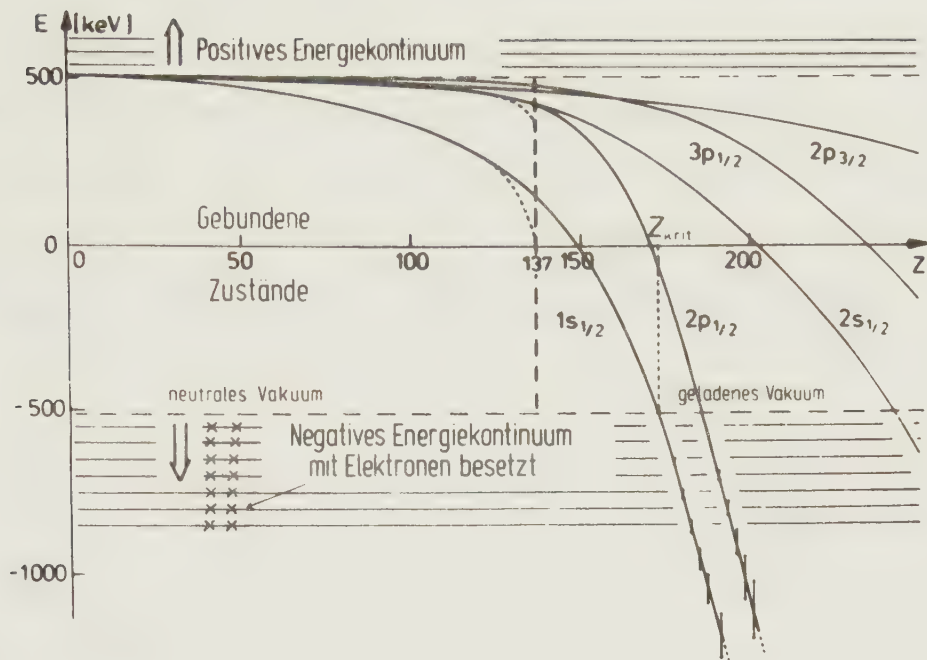


Bild 1: Das Lösungsspektrum der Diracgleichung für ein Elektron im Coulombfeld eines punktförmigen Kerns bricht bei der Ladung $Z = 1/\alpha \sim 137$ für alle gebundenen Zustände mit $j = 1/2$ (gestrichelte Linie) ab. Unter Berücksichtigung der endlichen Kernaussdehnung erreichen die Niveaus das negative Kontinuum $E = -m_e c^2$, zuerst der $1s_{1/2}$ -Zustand bei $Z_{kr} \sim 170$, danach der $2p_{1/2}$ -Zustand bei $Z_{kr} \sim 184$.

Positronerzeugung, die den Zerfall des neutralen Vakuums in einen neuen, geladenen Vakuumzustand anzeigt⁵⁻⁷. Die Wellenfunktion des eingetauchten Zustandes verteilt sich

mit einer gewissen Resonanzbreite über das negative Kontinuum. Der $2p_{1/2}$ Zustand taucht erst bei $Z_{kr} \sim 184$ ein. Alle anderen gebundenen Niveaus folgen bei noch höheren Ladungszahlen (Bild 1). Wird die Elektronenabschirmung durch Thomas-Fermi oder Hartree-Fock-Slater-Approximation berücksichtigt, so verschiebt sich der Wert für die kritische Ladung um wenige Einheiten nach oben⁸.

Damit der Zerfall des Vakuums nicht erst bei einer künstlichen Erzeugung superschwerer Elemente $Z > 170$ beobachtet werden kann, werden zum Test der Quantenelektrodynamik starker Felder kurzzeitig durch Schwerionenstöße elektrische Feldstärken erzeugt, die einer totalen Kernladung von $Z > 170$ entsprechen. Ist der Abstand zweier aneinander streuender Kerne kleiner als der Bohrsche Radius der innersten Elektronenschalen, dann bilden sich quasimolekulare Orbitale um die beiden Kernzentren, die sich zu quasiautomaren Orbitalen umformen können, wenn die beiden Kerne näher als 100 fm aneinander vorbeifliegen. Es entstehen kurzlebige Quasimoleküle. Ist die Target- und Projektilladung des sich bildenden Quasimoleküles größer als $Z > 170$, dann erreicht der molekulare $1s_{\sigma}$ Zustand bei einem kritischen Zweizentrenkernabstand das negative Kontinuum analog zum Fall der im Gedankenexperiment erhöhten Ladungszahl.

Wird dieser kritische Abstand R_{kr} überschritten, dann taucht der $1s\sigma$ Zustand in das negative Kontinuum ein. Wir können durch superschwere Quasimoleküle kurzzeitig überkritische Kerne simulieren und damit den Zerfall

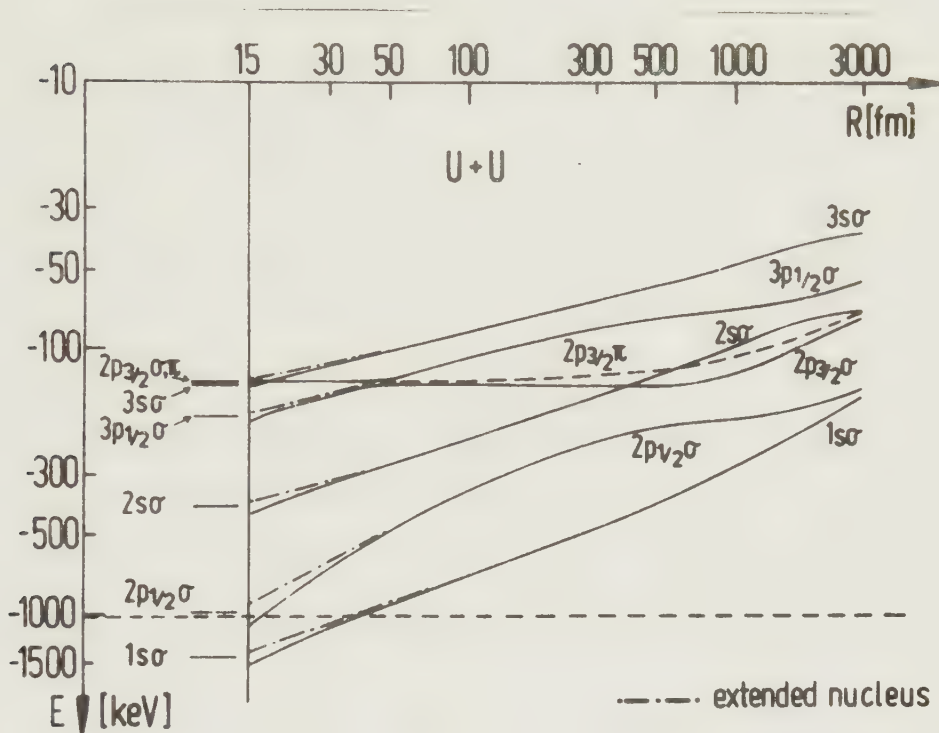


Bild 2: Das relativistische Korrelationsdiagramm für das quasimolekulare U-U System in doppellogarithmischer Darstellung. Aufgetragen sind in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand R die Bindungsenergie der untersten σ - (durchgezogen) und π (gestrichelt) Zuständen. Die strichpunktierten Linien geben die entsprechenden Energien für ausgedehnte Kerne wieder¹⁰.

des neutralen Vakuums in Schwerionenstößen beobachten^{7,9}. In Bild 2 haben wir die Bindungsenergien der am stärksten gebundenen Zustände des U-U Quasimoleküles in Abhängigkeit des Zweizentrenabstandes aufgetragen¹⁰. Der kritische Abstand ist für dieses System $R_{kr} \sim 36$ fm (siehe Kapitel IV.3.).

Neben dem schon besprochenen spontanen Zerfall des Vakuums gibt es noch den induzierten Zerfall des Vakuums und die direkte Paarerzeugung¹¹ (Bild 3), die während der Bildung überkritischer Quasimoleküle zu Positron-Elektron-Paarerzeugung führen können. Die dafür benötigten Löcher in der K-Schale müssen während des Stoßes dynamisch erzeugt werden, da Mehrfachstoßprozesse zwischen superschweren Atomen nicht möglich sind. Das in einem vorhergehenden Stoß erzeugte K-Loch hat eine viel zu kurze Lebensdauer ($\tau \sim 10^{-17}$ sec), um bis zum nächsten Stoß noch zu existieren.

In den ersten Rechnungen zur spontanen Positronenerzeugung wurde ein statisches Modell angenommen^{12,13}. Spätere Rechnungen verwendeten jedoch eine dynamische Beschreibung der spontanen und induzierten Positronenerzeugung^{11,14,15}. Die ersten Experimente zur Positronenerzeugung wurden in der GSI (Darmstadt) an zwei verschiedenen Versuchsanordnungen durchgeführt. Untersucht wurden mit beiden Verfahren die superschweren Zweizentrensysteme Pb-Pb, U-Pb und U-U¹⁶⁻¹⁸. Die neuesten Resultate auf diesem

Gebiet sind die doppelt differentiellen Messungen¹⁹ des Energiespektrums in Koinzidenz mit den unter einem bestimmten Winkel θ_{lab} gestreuten Teilchen²⁰.

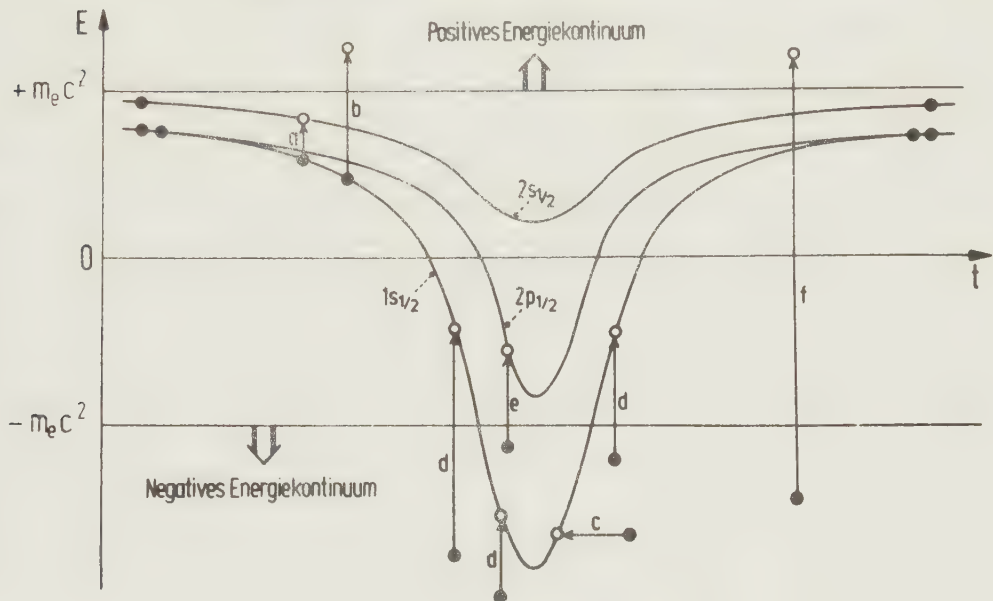


Bild 3: Die durch a und b gekennzeichneten Pfeile weisen auf die dynamische K-Locherzeugung hin, die durch Kopplung des $1s_{1/2}$ Niveaus zu den höheren gebundenen Zuständen oder durch direkte Ionisation ins positive Kontinuum entstehen können. Außer dem spontanen Zerfall des Vakuums (c), tritt durch Kopplung eines Loches während des Stoßes ans negative Kontinuum der induzierte Zerfall des Vakuums auf (d, e). Mit einer direkten Paarerzeugung durch die Stoßdynamik (f) ist zu rechnen.

Die Dynamik des Streuprozesses führt zu elektronischen Anregungen zwischen den gebundenen - und Kontinuumszuständen der Quasimoleküle. Die dadurch stattfindenden Strahlungsübergänge mit Photonenmission führen zu einem charakteristischen Zweig in den beobachteten Röntgenspektren (Bild 4). Obwohl die Interpretation dieser Spektren durch Untergrund- und konkurrierende Effekte erschwert wurde (Coulomb-Anregung²¹, Bremsstrahlungsprozesse beim Stoß der Kerne²², Elektroneneinfang (REC)²³), gelten sie heute als Nachweis der molekularen Orbitale in den Zweizentrensystemen. Ein weiteres Merkmal dieser quasimolekularen Strahlung ist die Anisotropie der Photonenwinkelverteilung. Von B. Müller et al²⁵ wurde diese Anisotropie^{26,27} theoretisch vorhergesagt und zuerst von J.S. Greenberg et al²⁸ experimentell bestätigt; ebenso von G. Kraft et al²⁴. Systematische Untersuchungen von W. Wölfli und Mitarbeitern zeigen einen Zusammenhang zwischen dem Maximum der Anisotropie und der K_{α} -Linie des vereinigten Quasiatoms auf²⁹.

Die ersten experimentellen Hinweise der quasimolekularen Röntgenstrahlen wurden in der K-Schale von Mac Donald et al, in der L-Schale von F. Saris et al und in der M-Schale von Mokler et al gegeben³⁰. Die Pionierarbeiten in zahlreichen Experimenten an unterschiedlichen Zweizentrensystemen zum Nachweis der Quasimoleküle sind von W.E. Meyerhof et al,

J.S. Greenberg et al, K.H. Kaun et al, K.O. Groeneveld et al und W. Wölfl et al geleistet worden³¹. Die ersten Koinzidenzmessungen wurden von H. Schmidt-Böcking et al³² durchgeführt.

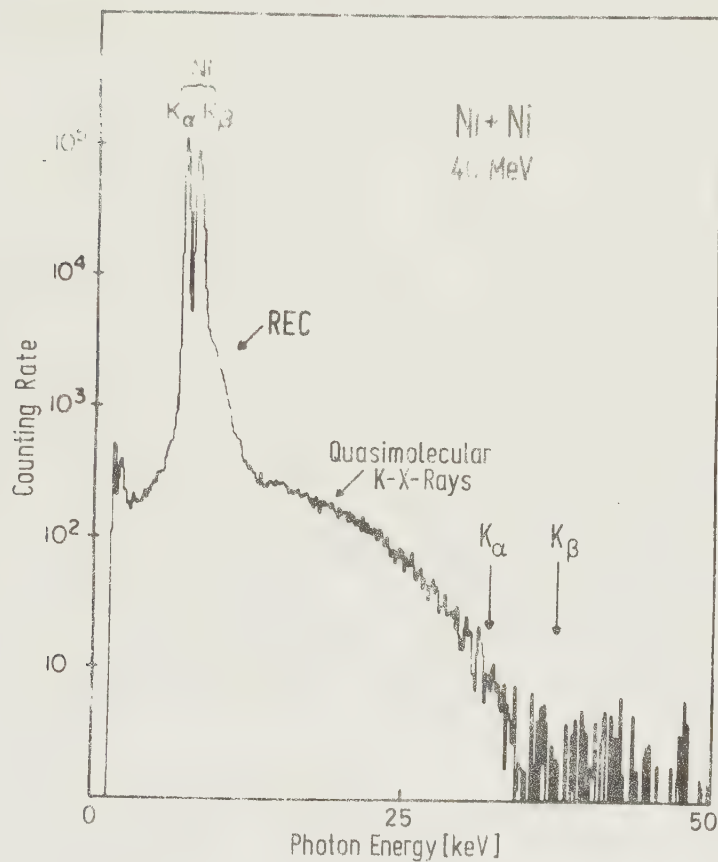


Bild 4: Das quasimolekulare K-Röntgenspektrum für das Ni-Ni System, das von Greenberg et al²⁸ gemessen wurde. Die Photonenenergien liegen oberhalb der charakteristischen K-Linien des Ni-Atoms.

Die theoretische Behandlung der molekularen Röntgenspektren, K-Schalenionisationen und der Anisotropie der MO-Röntgenstrahlung erfolgt in der semiklassischen Näherung durch die Lösung der zeitabhängigen Diracgleichung

$$i \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = H_{\text{Dirac}} \psi(\vec{r}, t). \quad (\text{I.1})$$

R.K. Smith et al.³³ entwickelte die Wellenfunktionen $\psi(\vec{r}, t)$ in einen vollständigen Satz von Basiszuständen

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n a_n(t) \phi_n(\vec{r}, R(t)) e^{-i \int_{-\infty}^t E_n dt'}, \quad (\text{I.2})$$

wobei $\phi_n(\vec{r}, R(t))$ die Lösungen der stationären Zweizentren-diracgleichung sind. Da die Kerne einer Rutherfordhyperbelbahn folgen, werden die Zweizentrenwellenfunktionen ϕ_n zeitabhängig. Damit können wir die Zeitabhängigkeit der Wellenfunktionen in eine Abhängigkeit des intermediären Abstandes der beiden Kerne überführen. Wir vernachlässigen die Kernkräfte³⁴, die Elektronenabschirmung^{35, 36} und die Vakuumpolarisation^{37, 38}.

Das quasimolekulare Modell zur Beschreibung des Schwerionenstoßes geht von einer sich adiabatisch ändernden Elektronenkonfiguration aus. Dies ist nur dann gewährleistet, wenn die Elektronen der intermediären Moleküle sich schneller als die Kerne bewegen. Die Adiabasiebedingung ist bei superschweren Zweizentrensystemen für die

inneren quasimolekularen Elektronenschalen recht gut erfüllt. Die "Umlaufzeiten" der Elektronen sind mit $\tau \sim 10^{-20}$ sec um eine Größenordnung kleiner als die Stoßzeiten in Schwerionenkollisionen ($\tau \sim 10^{-19}$ sec).

Setzen wir den Ansatz (2) in die Gleichung (1) ein, so erhalten wir ein unendliches System von gekoppelten Kanalgleichungen^{33,39,10}

$$\dot{a}_f(t) = - \sum_{i=f} a_i(t) \langle \phi_f | \frac{\partial}{\partial t} | \phi_i \rangle e^{i \int_{-\infty}^t dt' (E_f - E_i)} \quad (I.3)$$

Die Summation über i beinhaltet auch die Kontinuumszustände, die bisher nur in der Monopolnäherung berechnet wurden⁴⁰. Eine exakte Lösung der Zweizentrendiracgleichung für das Kontinuum steht noch aus. Besondere Schwierigkeiten folgen aus der Nichtseparierbarkeit der Zweizentrendiracgleichung. Der vollständige Satz der gekoppelten Differentialgleichungen erster Ordnung (3) ist mit der zeitabhängigen Diracgleichung (1) gleichwertig. Der $\frac{\partial}{\partial t}$ Operator läßt sich in zwei Teile aufspalten

$$\frac{\partial}{\partial t} = \dot{R} \frac{\partial}{\partial R} - i \vec{\omega} \cdot \vec{j} \quad (I.4)$$

wobei $\vec{\omega}$ die Winkelgeschwindigkeit der internuklearen Achse und $\vec{j}$ der Drehimpulsoperator des Elektrons ist. Der erste Term wird als radiale Kopplung, der zweite als Rotations- oder Corioliskopplung bezeichnet.

Zur Berechnung der Anregungsamplitude (3) müssen wir die Eigenwerte und Eigenfunktionen der stationären Zweizentrendiracgleichung für ein einzelnes Elektron bestimmen

$$\begin{aligned} H_{\text{TCD}} \phi_{\mu}(\vec{r}, R(t)) &= (c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m_e c^2 - \frac{Z_1 e^2}{r_1} - \frac{Z_2 e^2}{r_2}) \phi_{\mu}(\vec{r}, R(t)) = \\ &= E_{\mu} \phi_{\mu}(\vec{r}, R(t)) . \end{aligned} \quad (\text{I.5})$$

B. Müller (Frankfurt)⁴¹ löste durch Diagonalisation des Zweizentrendiracoperators erstmals die Zweizentrendiracgleichung. Ein numerisches Integrationsverfahren für symmetrische Punktkerne wurde kurze Zeit später von B. Müller und J. Rafelski entwickelt⁴².

Die durch das Integrationsverfahren gewonnenen relativistischen Wellenfunktionen wurden zur Berechnung der Kopplungsmatrixelemente für symmetrische Zweizentrenpunktkernsysteme verwendet^{43,47}, die zu einer ersten Abschätzung der K-Schalenionisation in U-U Stößen und Pb-Pb Stößen führen. Inzwischen sind für eine Reihe von superschweren Quasimolekülen die Abhängigkeit der K-Loch-Produktionen vom Stoßparameter bei unterschiedlichen Einschußenergien gemessen worden^{19,48}.

Die in dieser Arbeit diskutierten Zweizentrenenergien und die relativistischen Kopplungs- und Strahlungsmatrixelemente

bilden den Grundstock zur Berechnung der K-Schalenionisation, sowohl in Störungstheorie^{44-47,10,39,49-51} als auch in gekoppelten Kanalrechnungen⁵²⁻⁵⁴ unter Berücksichtigung der Mehrstufenanregungen⁵², der L-Schalenionisation^{55,50}, der quasimolekularen Röntgenspektren^{27,39,51,54,56} und der Anisotropie der MO-Strahlung^{40,57}. Zur Berechnung der Positronenerzeugung in Schwerionenstößen und des δ -Elektronenspektrums^{50,52,58-61} wurden die radialen Matrixelemente aus computertechnischen Gründen nur in der Monopolnäherung^{40,50} bestimmt.

Da diese Arbeit nur einen Teilaspekt aus der Quantenelektrodynamik starker Felder überstreicht, sei an dieser Stelle noch auf die Übersichtsartikel⁶² und deren umfangreiche Literaturangaben hingewiesen. Einen Überblick über das Gebiet vermitteln die allgemeinverständlichen Aufsätze⁶³.

II. Lösung der Zweizentrendiracgleichung für die gebundenen Zustände

In diesem Abschnitt diskutieren wir das Verfahren zur Lösung der stationären Zweizentrendiracgleichung für Einelektronensysteme. Wir entwickeln sowohl die Zweizentrenwellenfunktionen als auch das Zweizentrenpotential nach Multipolen. Den dadurch erhaltenen unendlichen Satz von gekoppelten radialen Differentialgleichungen erster Ordnung in r lösen wir numerisch durch ein Fünf-Punkte-Adams-Integrationsverfahren, indem wir von einer beschränkten Anzahl von Multipolkomponenten ausgehen. Die Integration beginnen wir bei kleinen r -Werten. Die Startkoeffizienten leiten wir aus der Lösung der Diracgleichung für ein Teilchen mit konstantem Potential her. Die Energieeigenwerte erhalten wir durch Iteration, die wir erst dann abbrechen, wenn die Energieänderung kleiner als 10^{-14} ist. Es wird gezeigt, wie sich die Wellenfunktionen mit negativer magnetischer Quantenzahl aus den Wellenfunktionen mit positiv magnetischer Quantenzahl berechnen lassen. Wir stellen am Schluß dieses Kapitels die Entwicklung der Zweizentrenpotentiale für Punktkerne und ausgedehnte Kerne symmetrischer und asymmetrischer Systeme vor und erläutern die verschiedenartigen Möglichkeiten ihrer Anwendung.

II.1. Multipolentwicklung der Wellenfunktion

Das Problem der relativen Bewegung eines Elektrons mit der Masse m und der Ladung $-e$ und zweier Kerne (Masse: M_1, M_2 , Ladung: $Z_1 e^2, Z_2 e^2$) reduziert sich auf das Problem der Bewegung eines Teilchens mit der effektiven

Masse $\mu = \frac{m(M_1+M_2)}{m+M_1+M_2} \sim m$ in dem Zweizentrencoulombfeld

$$V(r) = - \frac{Z_1 e^2}{r} - \frac{Z_2 e^2}{r}.$$

Die Diracgleichung in Kugelkoordinaten für ein Elektron lautet im Schwerpunktsystem der Kerne ($\hbar = c = 1$)

$$\left[i \gamma_5 \sigma_r \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} - \frac{\beta}{r} \hat{K} \right) - \frac{Z_1 e^2}{\left| \vec{r} - \frac{M_2}{M_1+M_2} \vec{R} \right|} - \frac{Z_2 e^2}{\left| \vec{r} - \frac{M_1}{M_1+M_2} \vec{R} \right|} + \beta_m \right] \psi_\mu(\vec{r}) = E \psi_\mu(\vec{r}). \quad (\text{II.1})$$

Der Spin-Bahn Operator wird durch folgende Beziehung definiert⁶⁴

$$\hat{K} = \beta(\vec{\sigma} \cdot \vec{l} + 1). \quad (\text{II.2})$$

Die Zweizentren-diracgleichung ist schwieriger zu handhaben als ihr nichtrelativistisches Analogon; denn sie ist in keinem orthogonalen Koordinatensystem separierbar.

Als ein günstiger Ansatz zur Lösung der Gleichung (1) hat

sich die Multipolentwicklung der Wellenfunktion

$$\psi_{\mu}(\vec{r}) = \sum_{\kappa} \phi_{\mu\kappa}(\vec{r}) = \sum_{\kappa} \begin{pmatrix} f_{\mu\kappa}(r) \chi_{\kappa}^{\mu} \\ i g_{\mu\kappa}(r) \chi_{-\kappa}^{\mu} \end{pmatrix} \quad (\text{II.3})$$

erwiesen. $\phi_{\mu}(\vec{r})$ ist ein vierkomponentiger Bispinor, $f_{\mu\kappa}(r)$ und $g_{\mu\kappa}(r)$ sind die radialen Wellenfunktionen, die auch als "große" bzw. "kleine" Komponenten des Spinors bezeichnet werden. Die Spin-Winkelfunktionen sind definiert durch

$$\chi^{\mu} = \sum_{m=\pm \frac{1}{2}} C(1 \frac{1}{2} j, \mu-m, m) Y_1^{\mu-m}(\vartheta, \varphi) \chi^m. \quad (\text{II.4})$$

Sie sind zweikomponentige Spinoren, die den winkelabhängigen Teil des Bispinors $\phi_{\mu\kappa}(\vec{r})$ bilden, wobei χ^m zweikomponentige Einheitsspinoren sind

$$\chi^m = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & m = + \frac{1}{2} \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & m = - \frac{1}{2} \end{cases}. \quad (\text{II.5})$$

Wir verwenden die Definition der Clebsh-Gordan-Koeffizienten nach E.M. Rose⁶⁴. Der Eigenwert von $\hat{K}$ ist $-\kappa$. Den Zusammenhang zwischen dem Bahndrehimpuls und Gesamtdrehimpuls mit κ erkennen wir durch die Beziehung

$$\kappa = \begin{cases} 1 & \text{für } j = 1 - \frac{1}{2} \\ -1-1 & \text{für } j = 1 + \frac{1}{2} \end{cases}. \quad (\text{II.6})$$

Das Zweizentrenpotential wird ebenfalls nach Legendre -
Polynomen entwickelt

$$V(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_1 V_1(r, R) P_1(\cos \vartheta) . \quad (\text{II.7})$$

Hierbei wurde bezüglich der z-Achse Zylindersymmetrie
vorausgesetzt.

Den Einfluß der Wahl unterschiedlicher Koordinatenschwer-
punkte und die Entwicklung der Zweizentrenpotentiale für
Punktkerne und ausgedehnte Kerne behandeln wir in Kapitel
II.4.

Setzen wir den Multipolansatz und die Entwicklung des
Zweizentrenpotentials in die Gleichung (1) ein, so er-
halten wir einen unendlichen Satz von gekoppelten radialen
Differentialgleichungen.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} g_{\mu\kappa}(r) &= \frac{\kappa-1}{r} g_{\mu\kappa}(r) - (E-m) f_{\mu\kappa}(r) + \\ &+ \sum_{\bar{\kappa}, l} f_{\mu\bar{\kappa}}(r) V_1(r, R) A_{(\kappa, l, \bar{\kappa})}^{\mu} , \end{aligned} \quad (\text{II.8})$$

.....

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} f_{\mu\kappa}(r) &= (E+m) g_{\mu\kappa}(r) - \frac{\kappa+1}{r} f_{\mu\kappa}(r) - \\ &- \sum_{\bar{\kappa}, l} g_{\mu\bar{\kappa}}(r) V_1(r, R) A_{(-\kappa, l, -\bar{\kappa})}^{\mu} . \end{aligned}$$

Die Koeffizienten $A_{(\kappa, 1, \bar{\kappa})}^{\mu} = \langle \chi_{\kappa}^{\mu} | P_1(\cos \vartheta) | \chi_{\bar{\kappa}}^{\mu} \rangle$ können leicht mit Hilfe der Drehimpulsalgebra bestimmt werden.

Es gilt

$$A_{(\kappa, 1, \bar{\kappa})}^{\mu} = \sum_{m=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} C\left(l_{\kappa} \frac{1}{2} j_{\kappa}, \mu_{\kappa}-m, m\right) C\left(l_{\bar{\kappa}} \frac{1}{2} j_{\bar{\kappa}}, \mu_{\bar{\kappa}}-m, m\right) (-1)^{\mu_{\kappa}-m} \sqrt{(2l_{\kappa}+1)(2l_{\bar{\kappa}}+1)} \begin{pmatrix} l_{\kappa} & 1 & l_{\bar{\kappa}} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{\kappa} & 1 & l_{\bar{\kappa}} \\ -\mu_{\kappa}+m & 0 & \mu_{\bar{\kappa}}-m \end{pmatrix} \quad (\text{II.9})$$

Ist in den gekoppelten radialen Differentialgleichungen die Energie $E > m_e c^2$, so gibt es bei beliebigen Abständen R zu jedem Wert E unendlich viele Eigenfunktionen. Wir nennen diese Lösungsschar das positive Kontinuum des Zweizentren Diracoperators. Ist die Energie kleiner als die zweifache Elektronenmasse $E < -m_e c^2$, so bilden sämtliche Lösungen der Differentialgleichung (1) das negative Kontinuum, welches im Bild der Diracschen Löchertheorie mit Elektronen aufgefüllt ist. Ist $m_e c^2 > E > -m_e c^2$, so gibt es für $\hat{H}_{TC}$ nur diskrete Eigenwerte. In dieser Arbeit untersuchen wir nur die gebundenen Zustände des Zweizentrensystems und die bei einem bestimmten Abstand R_{kr} in das negative Kontinuum eingetauchten Zweizentrenniveaus, die durch Diskretisierung der Wellenfunktion einen festen Energieeigenwert mit einer Zerfallsbreite Γ_E besitzen.

Der unendliche Satz von gekoppelten radialen Differentialgleichungen reduziert sich zu einem $2(2j_{\max} + 1)$ -fachen endlichen Differentialgleichungssystem, wenn wir uns auf eine kleine Anzahl von Multipolkomponenten ($1 \leq 5$) beschränken, deren größter Drehimpulswert $j_{\max}$ ist.

11.2. Die Startkoeffizienten

Die numerische ungünstige Divergenz des Differentialgleichungssystems in der Asymptotik $r \rightarrow 0$ überwinden wir durch Multiplikation mit dem Faktor $r^{1-|\kappa|}$ der beiden radialen Wellenfunktionen. Wir erhalten die neuen radialen Wellenfunktionen

$$\begin{aligned} F_{\mu\kappa}(r) &= r^{1-|\kappa|} f_{\mu\kappa}(r) \\ G_{\mu\kappa}(r) &= r^{1-|\kappa|} g_{\mu\kappa}(r) \end{aligned} \quad (II.10)$$

die den gekoppelten Differentialgleichungen

$$\begin{aligned} r \frac{d}{dr} G_{\mu\kappa}(r) &= (\kappa - |\kappa|) G_{\mu\kappa}(r) - r(E-m) F_{\mu\kappa}(r) + \\ &+ \sum_{\bar{\kappa}, 1} r^{|\bar{\kappa}| - |\kappa| + 1} F_{\mu\bar{\kappa}}(r) V_1(r, R) A_{(\kappa, 1, \bar{\kappa})}^{\mu} \end{aligned} \quad (II.11)$$

$$\begin{aligned} r \frac{d}{dr} F_{\mu\kappa}(r) &= -(\kappa + |\kappa|) F_{\mu\kappa}(r) + r(E+m) G_{\mu\kappa}(r) - \\ &- \sum_{\bar{\kappa}, 1} r^{|\bar{\kappa}| - |\kappa| + 1} G_{\mu\bar{\kappa}}(r) V_1(r, R) A_{(-\kappa, 1, -\bar{\kappa})}^{\mu} \end{aligned}$$

genügen.

Dieses System gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung in r wird numerisch integriert mit einem Fünf-Punkte-Adams-Integrationsverfahren⁶⁵ unter Verwendung

einer logarithmischen Stützstellenverteilung. Wir beginnen die Integration des Differentialgleichungssystems bei kleinen r -Werten, indem wir entsprechend der Anzahl der Multipolterme Konstanten zur Berechnung der Startkoeffizienten für die Wellenfunktion vorgeben. Außerdem müssen wir eine geeignete Startenergie wählen.

Die Startkoeffizienten berechnen wir mit Hilfe der Lösung der Diracgleichung für ein Teilchen mit konstantem Potential.

$$\psi_{\mu\kappa}(r) = \begin{pmatrix} j_1(k \cdot r) \chi_{\kappa}^{\mu} \\ \frac{ik \frac{\kappa}{|\kappa|}}{E-V+1} j_{\bar{1}}(k \cdot r) \chi_{-\kappa}^{\mu} \end{pmatrix}, \quad (\text{II.12})$$

wobei $k = \sqrt{(E-V)^2 - m^2}$ und $j_1(k \cdot r)$ die zugeordneten Besselfunktionen sind. Wir verwenden zur Abschätzung der Startkoeffizienten bei den Besselfunktionen die Näherung der langen Wellen ($k \cdot r \gg 1$)

$$j_1(k \cdot r) \sim \frac{(k \cdot r)^1}{(2 \cdot 1 + 1)!!} \quad (\text{II.13})$$

κ ist mit dem Drehimpuls l durch die Gleichung

$$l = \begin{cases} |\kappa| & \text{für } \kappa > 0 \\ |\kappa| - 1 & \text{für } \kappa < 0 \end{cases} \quad (\text{II.14})$$

verknüpft.

Bei der Definition von $\bar{l}$ sind die Beziehungen für $\kappa > 0$ und $\kappa < 0$ vertauscht

$$\bar{l} = \begin{cases} |\kappa| - 1 & \kappa > 0 \\ |\kappa| & \kappa < 0 \end{cases} \quad (II.15)$$

Durch Koeffizientenvergleich des vierkomponentigen Spinors mit den Lösungen für freie Teilchen ergibt sich für die radialen Komponenten

$$f_{\mu\kappa}(r) = d_{\kappa} j_{\bar{l}}(k \cdot r) \quad (II.16)$$

$$g_{\mu\kappa}(r) = c_{\kappa} \frac{k \cdot \frac{\kappa}{|\kappa|}}{E - V + 1} j_{\bar{l}}(k \cdot r) \quad .$$

d_{κ} und c_{κ} sind Konstanten, die zum Teil vorgegeben werden bzw. durch die nachfolgenden Gleichungen (20) bestimmt sind.

Für die divergenzunabhängigen radialen Wellenfunktionen

$F_{\mu\kappa}(r)$, $G_{\mu\kappa}(r)$ erhalten wir aus (16), (13)

$$\begin{aligned} F_{\mu\kappa}(r) &= \frac{d_{\kappa} j_{\bar{l}}(k \cdot r)}{r^{|\kappa| - 1}} = \frac{d_{\kappa} (k \cdot r)^{\bar{l}}}{(2\bar{l} + 1)!! r^{|\kappa| - 1}} = \\ &= d_{\kappa} \cdot \frac{k^{\bar{l}}}{(2\bar{l} + 1)!!} \cdot r^{\bar{l} + 1 - |\kappa|} \quad . \end{aligned} \quad (II.17)$$

Analog erhalten wir für die $G_{\mu\kappa}(r)$ -Komponente

$$G_{\mu\kappa}(r) = c_{\kappa} \frac{k^{\bar{l} + 1}}{(2\bar{l} + 1)!!} \frac{\frac{\kappa}{|\kappa|}}{E - V + 1} \cdot r^{\bar{l} + 1 - |\kappa|} \quad . \quad (II.18)$$

Setzen wir für l bzw. $\bar{l}$ die entsprechenden κ -Werte ein, so stellen wir fest, daß die Komponenten der radialen Wellenfunktion bei $r \rightarrow 0$ konstant bzw. proportional zu r sind.

$$\kappa < 0$$

$$F_{\mu\kappa}(r) \sim d_{\kappa} r^{|\kappa|-1+1-|\kappa|} = d_{\kappa} \quad (\text{II.19a})$$

$$G_{\mu\kappa}(r) \sim c_{\kappa} r^{|\kappa|+1-|\kappa|} = c_{\kappa} \cdot r$$

$$\kappa > 0$$

$$F_{\mu\kappa}(r) \sim d_{\kappa} r^{|\kappa|+1-|\kappa|} = d_{\kappa} \cdot r \quad (\text{II.19b})$$

$$G_{\mu\kappa}(r) \sim c_{\kappa} r^{|\kappa|-1+1-|\kappa|} = c_{\kappa} \quad .$$

Durch Vorgabe der nicht mit r verknüpften Konstanten d_{κ} und c_{κ} können wir die anderen Startkoeffizienten bestimmen, indem wir für $F_{\mu\kappa}(r)$ und $G_{\mu\kappa}(r)$ die Abschätzungen (19) in die gekoppelten Differentialgleichungen (11) einsetzen.

Wir erhalten für

$$\kappa < 0 \quad (\text{II.20a})$$

$$(1+2|\kappa|)c_{\kappa} = (m-E)d_{\kappa} + \begin{cases} \sum_{\bar{\kappa} > 0, 1} r^{|\bar{\kappa}|-|\kappa|+1} d_{\bar{\kappa}} V_1(r, R) A_{(\kappa, 1, \bar{\kappa})} \\ \sum_{\bar{\kappa} < 0, 1} r^{|\bar{\kappa}|-|\kappa|} d_{\bar{\kappa}} V_1(r, R) A_{(\kappa, 1, \bar{\kappa})} \end{cases} ,$$

$$\kappa > 0 \quad (\text{II.20b})$$

$$d_{\kappa} = (E+m)c_{\kappa} - \begin{cases} \sum_{\bar{\kappa} > 0, 1} r^{|\bar{\kappa}|-|\kappa|} c_{\bar{\kappa}} V_1(r, R) A_{(-\kappa, 1, -\bar{\kappa})} \\ \sum_{\bar{\kappa} < 0, 1} r^{|\bar{\kappa}|-|\kappa|+1} c_{\bar{\kappa}} V_1(r, R) A_{(-\kappa, 1, -\bar{\kappa})} \end{cases}$$

Sind die Startkoeffizienten der ersten vier radialen Stützstellen berechnet und damit die Komponenten $F_{\mu\kappa}(r)$ und $G_{\mu\kappa}(r)$ bekannt, so lösen wir anschließend das gekoppelte Differentialgleichungssystem (11) durch numerische Integration nach außen (Fünf-Punkte-Adams-Integrationsverfahren), beginnend bei $r_{\min} \sim 0,01 \text{ fm} = \frac{R}{1000} \text{ fm}$. Wir haben empirisch festgestellt, daß das Differentialgleichungssystem (11) bis zu einem etwa 10 fachen Bohrschen Radius (des vereinigten Atomes) der verschiedenen Zustände integriert werden muß.

$$r_{\max} = 52917,8 \cdot \left(\frac{10n^2\alpha}{Z_{\text{u.a.}}} + \frac{25n^2\alpha R}{10n^2\alpha + 1,5Z_{\text{u.a.}} \cdot R} \right) \text{ fm} \quad , \quad (\text{II.21})$$

wobei $Z_{\text{u.a.}} = Z_1 + Z_2$, $\alpha = 137,03602$, n = Hauptquantenzahl des Zustandes klassifiziert nach dem vereinigten System und R der Zweizentrenabstand ist.

Nach der ersten Integration von (11) sind die Lösungen des Gleichungssystems noch keine Eigenfunktionen. Wir verändern durch ein Gradientenverfahren die Startkoeffizienten und Startenergie⁴³ und integrieren erneut die Differentialgleichungen (11). Wir brechen diese Iteration ab, wenn die Randbedingung des Eigenwertproblems erfüllt ist - die radialen Wellenfunktionen fallen für $r \rightarrow \infty$ exponentiell ab - und die Änderung der Eigenenergie

kleiner als 10^{-14} ist. In diesem Fall ist die Genauigkeit der Eigenfunktion besser als $3 \cdot 10^{-3}$. Abschließend multiplizieren wir die Komponenten $F_{\mu\kappa}(r)$ und $G_{\mu\kappa}(r)$ mit $r^{|\kappa|-1}$ (Siehe Gl. 10) und normieren die ursprünglichen Komponenten des Bispinors (3)

$$\sum_{\kappa} \int_0^{\infty} (f_{\mu\kappa}^2(r) + g_{\mu\kappa}^2(r)) r^2 dr = 1 \quad . \quad (\text{II.22})$$

Tabelle 1 zeigt am Beispiel eines $1s$ Zustandes ($E = -235,72$ keV: Bei allen in dieser Arbeit angegebenen Bindungsenergien der Zweizentrenzustände wurde der Energienullpunkt an das positive Kontinuum gelegt, so daß ein Zustand bei $E = -1022,02$ keV in das negative Kontinuum eintaucht) im Pb-Pb-System bei $R = 1000$ fm den prozentualen Anteil ($1 \hat{=} 100\%$) der einzelnen Komponenten der radialen Wellenfunktion. Es wurden 6 Multipolterme verwendet. Als Abkürzungen verwenden wir

$$\tilde{F} = \frac{\int_0^{\infty} f_{\mu\kappa}^2(r) r^2 dr}{\sum_{\kappa} \int_0^{\infty} r^2 (f_{\mu\kappa}^2(r) + g_{\mu\kappa}^2(r)) dr} = \frac{\int_0^{\infty} f_{\mu\kappa}^2(r) r^2 dr}{\int_0^{\infty} (f_{\mu\kappa}^2(r) + g_{\mu\kappa}^2(r)) r^2 dr}$$

$$\tilde{G} = \frac{\int_0^{\infty} g_{\mu\kappa}^2(r) r^2 dr}{\sum_{\kappa} \int_0^{\infty} r^2 (f_{\mu\kappa}^2(r) + g_{\mu\kappa}^2(r)) dr} = \frac{\int_0^{\infty} g_{\mu\kappa}^2(r) r^2 dr}{\int_0^{\infty} (f_{\mu\kappa}^2(r) + g_{\mu\kappa}^2(r)) r^2 dr}$$

Tabelle 1

Kappa	-1	2	-3	4	-5	6
$\tilde{F}$	$9,855 \cdot 10^{-1}$	$1,079 \cdot 10^{-3}$	$2,235 \cdot 10^{-3}$	$8,318 \cdot 10^{-5}$	$1,508 \cdot 10^{-4}$	$1,900 \cdot 10^{-5}$
$\tilde{G}$	$6,382 \cdot 10^{-3}$	$3,438 \cdot 10^{-3}$	$6,729 \cdot 10^{-4}$	$2,890 \cdot 10^{-4}$	$1,223 \cdot 10^{-4}$	$6,085 \cdot 10^{-5}$

In Tabelle 2 sind an den innersten Stützstellen nach dem Abbruch der Iteration die radialen Komponenten $f_{\mu\kappa}(r)$ und $g_{\mu\kappa}(r)$ der Wellenfunktion $|1s\rangle$ bei $R = 1000$ fm am Beispiel des Pb-Pb Systems aufgelistet. Die Energie des Zustandes ist $E = -235,72$ keV, die Wellenfunktion ist nach (22) normiert. Die Komponenten folgen an den ersten 100 Stützstellen der Abschätzung (23), die wir aus der Lösung der Diracgleichung für freie Teilchen hergeleitet haben, indem wir (19) in (10) eingesetzt haben.

Es gilt

$$\kappa < 0 \quad f_{\mu\kappa}(r) \sim d_{\kappa} r^{|\kappa| - 1} \quad (\text{II.23.a})$$

$$g_{\mu\kappa}(r) \sim c_{\kappa} r^{|\kappa|}$$

$$\kappa > 0 \quad f_{\mu\kappa}(r) \sim d_{\kappa} r^{|\kappa|} \quad (\text{II.23.b})$$

$$g_{\mu\kappa}(r) \sim c_{\kappa} r^{|\kappa| - 1} .$$

Wir finden für die radialen Komponenten bei kleinen

r -Werten folgendes Verhalten: $f_{1-1}(r) \sim \text{konstant}$;

$f_{12}(r)$, $f_{1-3}(r)$, $g_{1-1}(r)$, $g_{12}(r) \sim r$; $g_{1-3}(r)$,

$g_{14}(r) \sim r^3$; $f_{14}(r) \sim r^4$.

I	R(I)	$f_{1-\{r\}}$	$f_{12}(r)$	$f_{1-\{r\}}$	$f_{14}(r)$	$g_{1-\{r\}}$	$g_{12}(r)$	$g_{1-\{r\}}$	$g_{14}(r)$
10	3.0190-03	6.9960-01-7.0580-07	9.9450-07-1.9350-12-3.3000-04-4.7350-04-7.2620-10-1.9860-09						
20	3.5800-03	6.9960-01-9.9240-07	1.3980-06-3.8250-12-3.9130-04-5.6150-04-1.2110-09-3.3110-09						
30	4.2450-03	6.9960-01-1.3950-06	1.9660-06-7.5630-12-4.6400-04-6.6580-04-2.0190-09-5.5210-09						
40	5.0340-03	6.9960-01-1.9620-06	2.7650-06-1.4950-11-5.5020-04-7.8950-04-3.3660-09-9.2050-09						
50	5.9690-03	6.9960-01-2.7590-06	3.6870-06-2.9560-11-6.5240-04-9.3620-04-5.6130-09-1.5350-08						
60	7.0780-03	6.9960-01-3.8800-06	5.4680-06-5.8450-11-7.7360-04-1.1100-03-9.3580-09-2.5590-08						
70	9.3930-03	6.9960-01-5.4550-06	7.6860-06-1.1560-10-9.1730-04-1.3160-03-1.5600-08-4.2670-08						
80	9.9520-03	6.9960-01-7.6700-06	1.0810-05-2.2850-10-1.0280-01-1.5610-03-2.6020-08-7.1150-08						
90	1.1800-02	6.9960-01-1.0790-05	1.5200-05-4.5180-10-1.2900-03-1.8510-03-4.3380-08-1.1860-07						
100	1.3990-02	6.9960-01-1.5160-05	2.1370-05-8.9320-10-1.5300-03-2.1950-03-7.2330-08-1.9780-07						
110	1.6590-02	6.9960-01-2.1320-05	3.0040-05-1.7660-09-1.8140-03-2.6020-03-1.2060-07-3.2980-07						
120	1.9680-02	6.9960-01-2.9980-05	4.2240-05-3.4910-09-2.1510-03-3.0460-03-2.0110-07-5.4980-07						
130	2.3330-02	6.9950-01-4.2160-05	5.9400-05-6.9030-09-2.5500-03-3.6590-03-3.3530-07-9.1670-07						
140	2.7670-02	6.9950-01-5.9270-05	8.1310-05-1.3650-08-3.0240-03-4.3380-03-5.5900-07-1.5280-06						
150	3.2610-02	6.9950-01-8.3330-05	1.1740-04-2.6980-08-3.5860-03-5.1440-03-9.3200-07-2.5480-06						
160	3.8910-02	6.9940-01-1.1720-04	1.6510-04-5.3330-08-4.2520-03-5.0980-03-1.5540-06-4.2470-06						
170	4.5130-02	6.9930-01-1.6470-04	2.3210-04-1.0540-07-5.0410-03-7.2290-03-2.5910-06-7.0790-06						
180	5.4710-02	6.9920-01-2.3150-04	3.2620-04-2.0840-07-5.9770-03-8.5690-03-4.3190-06-1.1600-05						
190	6.4870-02	6.9900-01-3.2540-04	4.5850-04-4.1170-07-7.0870-03-1.0160-02-7.2010-06-1.9660-05						
200	7.6920-02	6.9880-01-4.5730-04	6.4430-04-8.1350-07-8.4020-03-1.2030-02-1.2000-05-3.2750-05						
210	9.1210-02	6.9850-01-6.4260-04	9.0510-04-8.6070-06-9.9600-03-1.4250-02-2.0010-05-5.4530-05						
220	1.0620-01	6.9800-01-9.0250-04	1.2710-03-3.1730-06-1.1810-02-1.6870-02-3.3350-05-9.0740-05						
230	1.2830-01	6.9740-01-1.2670-03	1.7840-03-6.2600-06-1.3990-02-1.9960-02-5.5580-05-1.5090-04						
240	1.5210-01	6.9650-01-1.7780-03	2.5030-03-1.2340-05-1.6580-02-2.3600-02-9.2600-05-2.5070-04						
250	1.8030-01	6.9520-01-2.4920-03	3.5070-03-2.4310-05-1.9640-02-2.7860-02-1.5420-04-4.1580-04						
260	2.1390-01	6.9350-01-3.4880-03	4.9070-03-4.7800-05-2.3250-02-3.2830-02-2.5680-04-6.8820-04						
270	2.5360-01	6.9100-01-4.8750-03	6.8530-03-9.3760-05-2.7520-02-3.8600-02-4.2720-04-1.1360-03						
280	3.0070-01	6.8750-01-6.7950-03	9.5430-03-1.8330-04-3.2540-02-4.5200-02-7.1020-04-1.8650-03						
290	3.5660-01	6.8270-01-9.4370-03	1.3240-02-3.5680-04-3.8410-02-5.2660-02-1.1790-03-3.0450-03						
300	4.2280-01	6.7590-01-1.3040-02	1.8250-02-6.8970-04-4.5330-02-6.0890-02-1.9550-03-4.9250-03						

II.3. Unterscheidung der gebundenen Zustände mit positiver bzw. negativer magnetischer Quantenzahl

Wie wir in Kapitel III.1 zeigen werden, ist die magnetische Quantenzahl μ sowohl für symmetrische als auch asymmetrische Zweizentrensysteme eine gute Quantenzahl. Es gibt somit zu jedem Zustand mit der Energie E zwei Wellenfunktionen $\psi_{\mu}(r)$ und $\psi_{-\mu}(r)$, die sich nur durch das Vorzeichen der magnetischen Quantenzahl μ unterscheiden. Wir zeigen nun, daß durch Vorzeichenänderung einiger radialer Komponenten ($\kappa > 0$ oder $\kappa < 0$), die Wellenfunktion $\psi_{-\mu}(r)$ aus $\psi_{\mu}(r)$ hervorgeht. Ohne Einschränkung der Allgemeinheit können wir davon ausgehen, daß die Koeffizienten $A^{\mu}_{(\kappa, l, \bar{\kappa})}$ (9) reell sind.

Dadurch sind ebenfalls alle $f_{\mu\kappa}(r)$ und $g_{\mu\kappa}(r)$ reell. Die Wellenfunktion mit negativ magnetischer Quantenzahl genügt den gekoppelten Differentialgleichungen

$$\frac{d}{dr} g_{-\mu\kappa}(r) = \frac{\kappa-1}{r} g_{-\mu\kappa}(r) - (E-m) f_{-\mu\kappa}(r) + \quad (II.24)$$

$$+ \sum_{\bar{\kappa}, l} f_{-\mu\bar{\kappa}}(r) V_1(r, R) A^{-\mu}_{(\kappa, l, \bar{\kappa})} ,$$

.....

$$\frac{d}{dr} f_{-\mu\kappa}(r) = (E+m) g_{-\mu\kappa}(r) - \frac{\kappa+1}{r} f_{-\mu\kappa}(r) -$$

$$- \sum_{\bar{\kappa}, l} g_{-\mu\bar{\kappa}}(r) V_1(r, R) A^{-\mu}_{(-\kappa, l, -\bar{\kappa})} .$$

Unter der Verwendung der Beziehung ⁶⁴

$$\chi_{\mathbf{k}}^{-\mu} = i(-1)^{1_{\mathbf{k}} - j_{\mathbf{k}} + \mu} \sigma_2 \chi^{*\mu} = i(-1)^{\mu + \frac{1}{2}} S_{\mathbf{k}} \sigma_2 \chi^{*\mu}, \quad (\text{II.25})$$

wobei $S_{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|}$ ist, können wir die Koeffizienten $A_{(\mathbf{k}, 1, \mathbf{k})}^{-\mu}$ in Relation zu $A_{(\mathbf{k}, 1, \mathbf{k})}^{\mu}$ setzen. Setzen wir Gl. (25) in die Bestimmungsgleichung der Koeffizienten $A_{(\mathbf{k}, 1, \mathbf{k})}^{-\mu}$ ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} A_{(\mathbf{k}, 1, \mathbf{k})}^{-\mu} &= (-1)^{2\mu + \frac{1}{2} S_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} S_{\mathbf{k}}} \langle \chi_{\mathbf{k}}^{*\mu} | \sigma_2^+ P_1 \sigma_2 | \chi_{\mathbf{k}}^{*\mu} \rangle \quad (\text{II.26}) \\ &= (-1)^{2\mu + \frac{1}{2} S_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} S_{\mathbf{k}}} \langle \chi_{\mathbf{k}}^{*\mu} | P_1 | \chi_{\mathbf{k}}^{*\mu} \rangle \\ &= (-1)^{2\mu + \frac{1}{2} S_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} S_{\mathbf{k}}} \langle \chi_{\mathbf{k}}^{*\mu} | P_1^* | \chi_{\mathbf{k}}^{*\mu} \rangle \\ &= (-1)^{2\mu + \frac{1}{2} S_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} S_{\mathbf{k}}} A_{(\mathbf{k}, 1, \mathbf{k})}^{*\mu}. \end{aligned}$$

Da die $A_{(\mathbf{k}, 1, \mathbf{k})}^{\mu}$ reell sind und 2μ immer ungerade ist, folgt

$$A_{(\mathbf{k}, 1, \mathbf{k})}^{-\mu} = (-1)^{\frac{1}{2} (S_{\mathbf{k}} + 1) + \frac{1}{2} (S_{\mathbf{k}} + 1)} A_{(\mathbf{k}, 1, \mathbf{k})}^{\mu} \quad (\text{II.27})$$

Wir erhalten analog

$$A_{(-\mathbf{k}, 1, -\mathbf{k})}^{-\mu} = (-1)^{\frac{1}{2} (S_{\mathbf{k}} + 1) + \frac{1}{2} (S_{\mathbf{k}} + 1)} A_{(-\mathbf{k}, 1, -\mathbf{k})}^{\mu} \quad (\text{II.28})$$

Multiplizieren wir von links die Gleichungen (24) mit dem Faktor $(-1)^{1/2(S_{\kappa}+1)}$, so ergibt sich unter Berücksichtigung der Gleichungen (27) und (28)

$$(-1)^{1/2(S_{\kappa}+1)} \frac{d}{dr} g_{-\mu\kappa}(r) = \frac{\kappa-1}{r} (-1)^{1/2(S_{\kappa}+1)} g_{-\mu\kappa}(r) -$$

$$- (E-m) \cdot (-1)^{1/2(S_{\kappa}+1)} f_{-\mu\kappa}(r) + \sum_{\bar{\kappa}, 1} (-1)^{1/2(S_{\kappa}+1)}$$

$$f_{-\mu\bar{\kappa}}(r) V_1(r, R) (-1)^{1/2(S_{\kappa}+1) + 1/2(S_{\bar{\kappa}}+1)} A_{(\kappa, 1, \bar{\kappa})}^{\mu}, \quad (\text{II.29})$$

$$(-1)^{1/2(S_{\kappa}+1)} \frac{d}{dr} f_{-\mu\kappa}(r) = (E+m) (-1)^{1/2(S_{\kappa}+1)} g_{-\mu\kappa}(r) -$$

$$- \frac{\kappa+1}{r} (-1)^{1/2(S_{\kappa}+1)} f_{\mu\kappa}(r) - \sum_{\bar{\kappa}, 1} (-1)^{1/2(S_{\kappa}+1)}$$

$$g_{-\mu\bar{\kappa}}(r) V_1(r, R) (-1)^{1/2(S_{\kappa}+1) + 1/2(S_{\bar{\kappa}}+1)} A_{(-\kappa, 1, -\bar{\kappa})}^{\mu}.$$

Da der Faktor $(-1)^{1/2(S_{\kappa}+1)}$ stets positiv ist, sehen wir sofort, daß $(-1)^{1/2(S_{\kappa}+1)} f_{-\mu\kappa}(r)$ bzw. $(-1)^{1/2(S_{\kappa}+1)} g_{-\mu\kappa}(r)$ dasselbe Differentialgleichungssystem erfüllt wie $f_{\mu\kappa}(r)$ bzw. $g_{\mu\kappa}(r)$.

Somit gilt

$$\psi_{-\mu}(r) = \sum_{\kappa} \begin{pmatrix} f_{-\mu\kappa}(r) & \chi_{\kappa}^{-\mu} \\ ig_{-\mu\kappa}(r) & \chi_{-\kappa}^{-\mu} \end{pmatrix} = \sum_{\kappa} \begin{pmatrix} f_{\mu\kappa}(r) & \chi_{\kappa}^{\mu} \\ ig_{\mu\kappa}(r) & \chi_{-\kappa}^{\mu} \end{pmatrix} \begin{matrix} \text{für } \kappa > 0 \\ \text{für } \kappa < 0 \end{matrix} \quad (\text{II.30})$$

und damit haben wir gezeigt, daß $\psi_{-\mu}(r)$ aus $\psi_{\mu}(r)$ erzeugt werden kann, indem wir entweder alle radialen Wellenfunktionen $f_{\mu\kappa}$, $g_{\mu\kappa}$ mit $\kappa > 0$ oder mit $\kappa < 0$ mit (-1) multiplizieren.

II.4 Das Zweizentrenpotential

Einer der Hauptvorteile der Multipolentwicklung der Zweizentrenwellenfunktionen ist neben der analytischen Behandlung des Winkelanteils bei der Berechnung von Matrixelementen, die Möglichkeit, ein beliebiges axial-symmetrisches Potential $V(r,R)$ durch die Multipolentwicklung (7)

$$V_1(r,R) = - \frac{2l+1}{2} \int_0^\pi d \cos \vartheta \, P_l(\cos \vartheta) V(r,R). \quad (\text{II.31})$$

in die gekoppelten Differentialgleichungen (8) einzuarbeiten; so lange der Grenzwert

$$\lim_{l \rightarrow \infty} V_l(r,R) = 0 \quad (\text{II.32})$$

für jedes r erfüllt wird.

Die in den vorhergehenden Abschnitten beschriebene Lösung der Zweizentren-diracgleichung kann deshalb nicht nur für Punktkerne und ausgedehnte Kerne mit beliebigem Koordinatenursprung benutzt werden, sondern auch zum Beispiel Zweizentrenpotentiale verwenden, die eine Elektronenabschirmung berücksichtigen (siehe Hartree-Ansatz im Kapitel VIII). Ein relativistisches Zweizentren-Thomas-Fermi-Potential wurde vor kurzem von E. Gross (Frankfurt) entwickelt⁶⁶.

II. 4.a Potential zweier Punktkerne

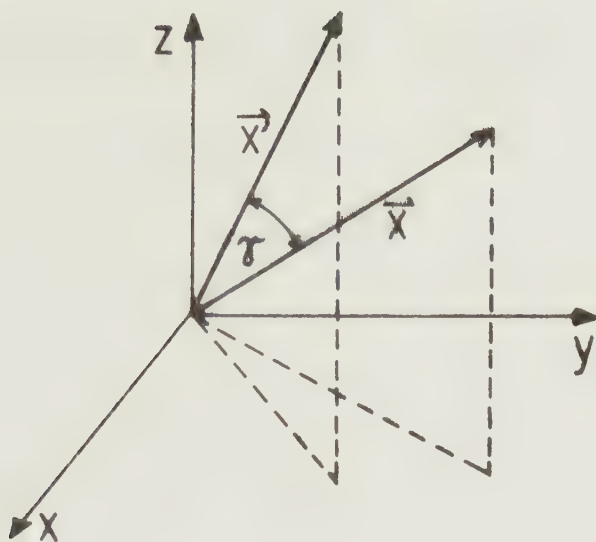
Beginnen wir mit der Entwicklung des Zweizentrenpotentials für Punktkerne. Als Koordinatenursprung wählen wir den Massenschwerpunkt. Die Lösung der ZweizentrenDiracgleichung mit diesem Koordinatenursprung ist nur solange sinnvoll, solange die Zweizentrenzustände molekularen Charakter haben, d.h., die Elektronen sind noch nicht an einem der beiden Kerne lokalisiert. Diese Einschränkung deckt sich mit dem Begriffsbild des Quasimoleküles. Da wir vor allem an der Lösung der ZweizentrenDiracgleichung für Quasimoleküle interessiert sind, können wir für diesen Fall immer den Massenschwerpunkt als Koordinatenursprung wählen.

Die klassische Multipolentwicklung eines Potentials am Orte $\vec{x}$, das durch eine Ladung am Orte $\vec{x}'$ hervorgerufen wird, ist gegeben durch

$$\frac{1}{|\vec{x}-\vec{x}'|} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} P_l(\cos\gamma) \quad , \quad (\text{II.33})$$

wobei $r_{<}$ ($r_{>}$) der kleinere (größere) Term von $|\vec{x}|$ und $|\vec{x}'|$ ist. Wie im Bild 5 gezeigt wird, ist γ der Winkel zwischen $\vec{x}$ und $\vec{x}'$.⁶⁷

Bild 5:



Entwickeln wir nach der Vorschrift (33) das Zweizentrenpotential für Punktkerne. Wir bezeichnen mit R den Zweizentrenabstand,

$$\vec{s}_1 = \frac{M_2}{M_1 + M_2} \cdot \vec{R}, \quad \vec{s}_2 = -\frac{M_1}{M_1 + M_2} \cdot \vec{R} \quad (\text{II.34})$$

sind die Abstände der beiden Kerne von der Ladung Z_1 bzw. Z_2 (Bild 6).

Wir erhalten folgende Multipolentwicklung des Zweizentrenpotentials

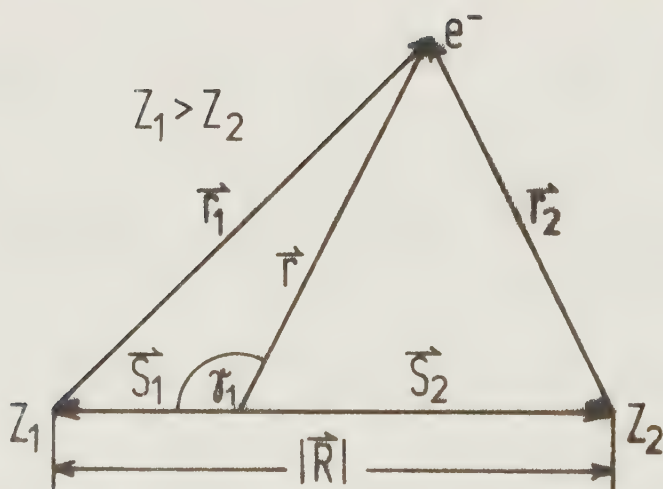
$$V(\vec{r}, \vec{R}) = V_1(\vec{r}, \vec{R}) + V_2(\vec{r}, \vec{R}) = -\frac{Z_1 e^2}{|\vec{r} - \vec{s}_1|} - \frac{Z_2 e^2}{|\vec{r} - \vec{s}_2|} \quad (\text{II.35})$$

$$V(\vec{r}, \vec{R}) = \begin{cases} - \sum_{i=1}^2 Z_i e^2 \left(\sum_{l=0}^{\infty} \epsilon_i \frac{r^l}{S_i^{l+1}} P_l(\cos \vartheta_1) \right) & \text{für } r \leq S_i \\ - \sum_{i=1}^2 Z_i e^2 \left(\sum_{l=0}^{\infty} \epsilon_i \frac{S_i^l}{r^{l+1}} P_l(\cos \vartheta_1) \right) & \text{für } r \geq S_i \end{cases} \quad (\text{II.36})$$

mit $\epsilon_i = \begin{cases} 1 & i = 1 \\ (-1)^1 & i = 2 \end{cases}$ (II.37)

$$S_i = \begin{cases} \frac{M_2}{M_1 + M_2} \cdot R & i = 1 \\ \frac{M_1}{M_1 + M_2} \cdot R & i = 2 \end{cases} \quad (\text{II.38})$$

Bild 6:



Hierbei berücksichtigen wir, daß

$$\gamma_2 = \pi - \gamma_1 \Rightarrow \cos \gamma_2 = \cos (\pi - \gamma_1) = -\cos \gamma_1 \quad (\text{II.39})$$

und damit

$$P_1 (\cos \gamma_2) = (-1)^1 P_1 (\cos \gamma_1) \quad (\text{II.40})$$

ist.

Lösen wir die Zweizentrendiracgleichung für quasimolekulare Systeme mit einer maximalen Gesamtladung von $Z_{\text{u.a.}} = Z_1 + Z_2 < 90$, so ist es gerechtfertigt, das Zweizentrenpotential für Punktkerne (36) zu verwenden. Erst bei superschweren Quasimolekülen ($Z_{\text{u.a.}} \gtrsim 150$), im Bereich kleiner Zweizentrenabstände ($R < 100 \text{ fm}$) unterscheiden sich die Lösungen mit Punktkernen massiv von den Ergebnissen mit ausgedehnten Kernen. Die Anzahl der Entwicklungsterme der Wellenfunktion und damit auch des Potentials muß erhöht werden, wenn wir bei gleichbleibender Genauigkeit der Eigenwertlösungen zu größeren Abständen übergehen. Aus computertechnischen Gründen jedoch können wir nicht beliebig viele Terme mitnehmen. Es erhöht sich nicht nur der Speicherplatzbedarf, sondern die Rechenzeit verdoppelt sich, wenn ein zusätzlicher Multipolterm berücksichtigt wird. Ist n die Anzahl der Entwicklungsterme der

Wellenfunktion (3), so beträgt die Rechenzeit

$$T_{\text{com}} = 2,5 * 2^{(n-1)} \text{ sec} \quad \text{für Punktkerne} \quad (\text{II.41})$$

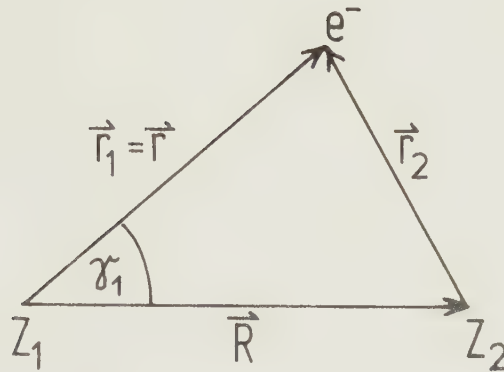
$$T_{\text{com}} = 3,5 * 2^{(n-1)} \text{ sec} \quad \text{für ausgedehnte Kerne.}$$

Die in dieser Arbeit vorgestellten symmetrischen Systeme wurden mit 4, die asymmetrischen mit 6 Multipolen berechnet. Da die Parität eine gute Quantenzahl für symmetrische Systeme ist, werden nur die Entwicklungsterme mit gleicher Parität berücksichtigt. Im asymmetrischen Fall würde dies einer Entwicklung mit 8 Termen entsprechen. Die dadurch gewonnene Genauigkeit rechtfertigt jedoch nicht die zu hohe Rechenzeit. Eine weitere Entscheidungsgrundlage ist der Speicherplatz. Die Wellenfunktionen für 21 Zustände eines Abstandes R benötigen ca. 1,2 M Byte Speicherkapazität.

Sind wir an der Lösung der Zweizentrendiracgleichung für große Abstände interessiert ($R \gg 10\,000 \text{ fm}$), so bietet sich die Verlagerung des Koordinatenursprungs vom Ladungsschwerpunkt in das Zentrum eines der beiden Kerne an. Bei Abständen größer als $10\,000 \text{ fm}$ haben die innersten Zustände keinen molekularen Charakter. Vielmehr sind sie an einem der beiden Kernzentren lokalisiert. Je nach dem, um welches Kernzentrum sich ein Zustand ansiedelt, ent-

wickeln wir das Zweizentrenpotential für Punktkerne am Kern 1 oder 2.

Bild 7:



Das Zweizentrenpotential am Koordinatenursprung des Kernes mit der Ladung Z_1 (Bild 7) lautet

$$V(\vec{r}, \vec{R}) = - \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r}_1|} - \frac{Z_2 e^2}{|\vec{r}_2|} = - \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r}|} - \frac{Z_2 e^2}{|\vec{r} - \vec{R}|} \quad (\text{II.42})$$

und damit die Multipolentwicklung.

$$V(r, R) = \begin{cases} - \frac{Z_1 e^2}{r} - Z_2 e^2 \sum_{l=0} \frac{r^l}{R^{l+1}} P_l(\cos \alpha_1) & \text{für } r \leq R \\ - \frac{Z_1 e^2}{r} - Z_2 e^2 \sum_{l=0} \frac{R^l}{r^{l+1}} P_l(\cos \alpha_1) & \text{für } r \geq R \end{cases} \quad (\text{II.43})$$

Liegt das Koordinatenzentrum nicht im Kern 1, sondern 2, dann erhalten wir analoge Ausdrücke für das Potential, wir müssen bloß dabei Z_1 mit Z_2 vertauschen.

II.4.b Potential zweier ausgedehnter Kerne

Im Gegensatz zur Entwicklung des Zweizentrenpotentials bei großen Abständen R , wo wir nur Punktkerne berücksichtigen müssen, wird der Einfluß der Kernaushdehnung um so größer, je kleiner der Abstand R und je größer die Ladung des vereinigten Systems ist (siehe Kapitel IV). Die Entwicklung des Zweizentrenpotentials nach Multipolen für ausgedehnte Kerne symmetrischer Quasimoleküle ist bekannt⁶⁸. Im Rahmen dieser Arbeit sind für asymmetrische Systeme die Zweizentrenpotentiale mit ausgedehnten Kernen nach Multipolen entwickelt worden (Koordinatenursprung liegt im Massenschwerpunkt). Gleichzeitig wurde das Integrationsverfahren zur Berechnung des Potentials beschleunigt (Faktor 2-3). Bei unserer Entwicklung nehmen wir eine homogene Ladungsverteilung im Kern an. ϱ_1, ϱ_2 sind die Kerndichten; a_1, a_2 die Kernradien der beiden Kerne. Das Zweizentrenpotential ist in folgender Weise definiert

$$V(\vec{r}, \vec{R}) = - \int_{V_1} \frac{\varrho_1(\vec{r}'_1)}{|\vec{r} - \vec{r}'_1|} d^3 r_1 - \int_{V_2} \frac{\varrho_2(\vec{r}'_2)}{|\vec{r} - \vec{r}'_2|} d^3 r_2 \quad (\text{II.44})$$

Die Multipolentwicklung liefert

$$V(\vec{r}, \vec{R}) = - \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \theta) * \quad (\text{II.45})$$

$$\begin{aligned}
 & * \left(\frac{3Z_1 e^2}{2a_1^3} \int_{S_1 - a_1}^{S_1 + a_1} dr' r'^2 \frac{r_1^1}{r_1^{1+1}} \int_{\cos \theta'_{01}}^1 P_1(x) dx + \right. \\
 & \left. + (-1)^1 \frac{3Z_2 e^2}{2a_2^3} \int_{S_2 - a_2}^{S_2 + a_2} dr' r'^2 \frac{r_2^1}{r_2^{1+1}} \int_{-\cos \theta'_{02}}^1 P_1(x) dx \right), \quad (II.45)
 \end{aligned}$$

wobei S_1 und S_2 nach Gleichung (34) und

$$\cos \theta'_{01} = \frac{r_1'^2 + S_1^2 - a_1^2}{2r_1' S_1} \quad (II.46)$$

$$\cos \theta'_{02} = \frac{a_2^2 - r_2'^2 - S_2^2}{2r_2' S_2} \quad (II.47)$$

mit Hilfe des Cosinussatzes an Hand der Abbildung 8 hergeleitet wurden. Nach Bild 8 wird das Zweizentrenpotential in drei Bereiche eingeteilt. Wir bezeichnen mit $V_0(r)$ den Monopolanteil des Potentials, den wir durch einen einfachen analytischen Ausdruck ersetzen können.

Wir erhalten für Bereich I

$$r \leq S_i - a_i$$

$$\begin{aligned}
 V(r, R) = V_0(r) - \sum_{l=1}^{\infty} P_l(\cos \theta_1) \sum_{i=1}^2 \left(\epsilon_i \frac{3Z_i e^2}{2a_i^3} r^l \frac{1}{l+1} \right. \\
 \left. * \int_{S_i - a_i}^{S_i + a_i} r'^{l-1} dr' (P_{l-1}(\cos \theta'_i) - \cos \theta'_i \cdot P_l(\cos \theta'_i)) \right) \quad (II.48.1)
 \end{aligned}$$

mit

$$V_0(r) = \sum_{i=1}^2 - \frac{Z_i e^2}{S_i} \quad (II.49.1)$$

Für Bereich II gilt

$$S_i - a_i \leq r \leq S_i + a_i$$

$$V(r, R) = V_o(r) - \sum_{l=1}^{\infty} P_l(\cos \theta_1) \cdot \sum_{i=1}^2 \left(\epsilon_i \frac{3Z_i e^2}{2a_i^3} \left[\frac{1}{r^{l+1}} \frac{1}{l+1} \right. \right. \\ \left. \left. * \int_{S_i - a_i}^r r'^{l+2} dr' (P_{l-1}(\cos \theta_i') - \cos \theta_i' \cdot P_l(\cos \theta_i')) \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{r^l}{l+1} \int_r^{S_i + a_i} r'^{l-1} (P_{l-1}(\cos \theta_i') - \cos \theta_i' \cdot P_l(\cos \theta_i')) dr' \right] \right) \quad (\text{II.48.2})$$

mit

$$V_o(r) = \sum_{i=1}^2 - \frac{3}{2} \frac{Z_i e^2}{a_i^3} \left(\frac{a_i^3}{3} \left(\frac{1}{r} + \frac{1}{S_i} \right) + \frac{1}{24} \left(\frac{S_i^3}{r} + \frac{r^3}{S_i} \right) \right. \\ \left. - \frac{a_i^2}{4} \left(\frac{S_i}{r} + \frac{r}{S_i} \right) - \frac{1}{6} (r^2 + S_i^2) + \frac{a_i^2}{2} + \frac{r S_i}{4} - \frac{a_i^4}{8 r S_i} \right) \quad (\text{II.49.2})$$

Für Bereich III gilt

$$r \geq S_i + a_i$$

$$V(r, R) = V_o(r) - \sum_{l=1}^{\infty} P_l(\cos \theta_1) \sum_{i=1}^2 \left(\epsilon_i \frac{3Z_i e^2}{2a_i^3} \frac{1}{r^{l+1}} \frac{1}{l+1} \right. \\ \left. * \int_{S_i - a_i}^{S_i + a_i} r'^{l+2} (P_{l-1}(\cos \theta_i') - \cos \theta_i' \cdot P_l(\cos \theta_i')) dr' \right) \quad (\text{II.48.3})$$

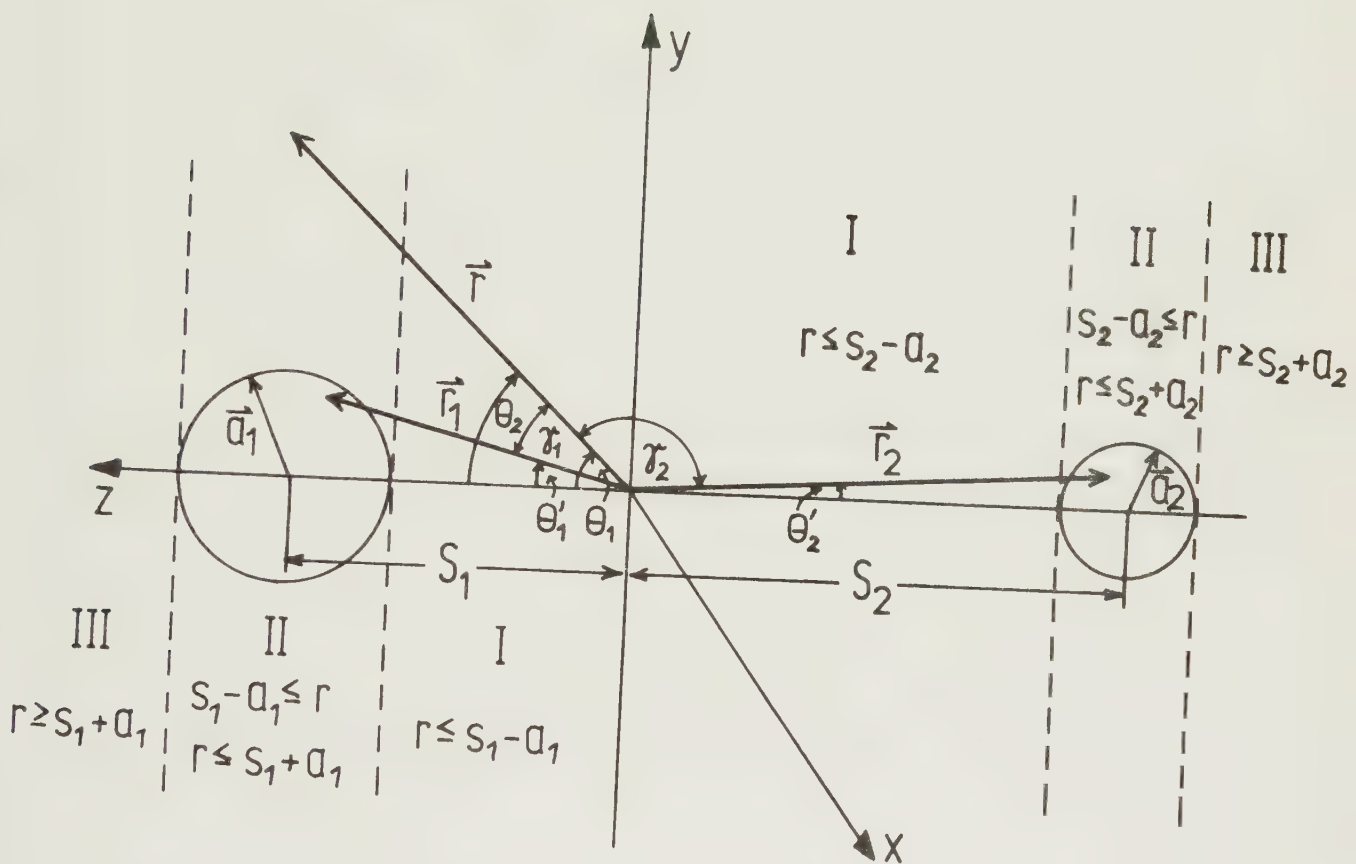
mit

$$V_o(r) = \sum_{i=1}^2 - \frac{Z_i e^2}{r} \quad (\text{II.49.3})$$

Es wurden die Abkürzungen (37) und (38) verwendet.
 Außerdem gilt für $i = 1, 2$

$$\cos \theta_i = \left(\frac{r_i'^2 + S_i'^2 - a_i'^2}{2r_i' S_i'} \right) \quad (\text{II.50})$$

Bild 8:



III. Energieniveaus der gebundenen Zustände in superschweren Quasimolekülen

Die zeitliche Änderung des Zweizentrenabstandes und damit des Zweizentrenpotentials während des Schwerionenstoßes führt zu einer zeitlichen Änderung der Bindungsenergien der Elektronenzustände. Diese Elektronenniveaus müssen in irgendeiner Weise klassifiziert werden. Deshalb untersuchen wir in diesem Kapitel, welche Quantenzahlen in symmetrischen und asymmetrischen Zweizentrensystemen Erhaltungsgrößen sind und erörtern die unterschiedlichen Kreuzungsarten der Energieniveaus. Zur Beschreibung der adiabatischen Zustände können wir zwei verschiedenartige Bezeichnungsweisen verwenden. Die erste Nomenklatur ist mit dem Charakter der Wellenfunktion verbunden, die zweite folgt den Energieniveaus. Vor- und Nachteile beider Notationen werden erörtert. Abschließend werden wir die Phasen der molekularen Wellenfunktionen im Bereich der verbotenen Kreuzungen untersuchen.

III.1 Quantenzahl des Zweizentrensystems

Im Fall symmetrischer Zweizentrensysteme kommutiert der Zweizentren-Diracoperator

$$\hat{H}_{TC} = i \gamma_5 \sigma_r \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} - \frac{\beta}{r} \hat{K} \right) - V_1(r_1) - V_2(r_2) + \beta m_e \quad (\text{III.1})$$

sowohl mit $\hat{j}_z$ (Projektion des Gesamtdrehimpulses auf die Verbindungsachse der beiden Kerne), als auch mit dem Paritätsoperator $\beta \hat{I}_s$ ($\hat{I}_s$ beschreibt die Inversion $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$)

$$[\hat{H}_{TC}, \beta \hat{j}_z]_- = 0 \quad (\text{III.2})$$

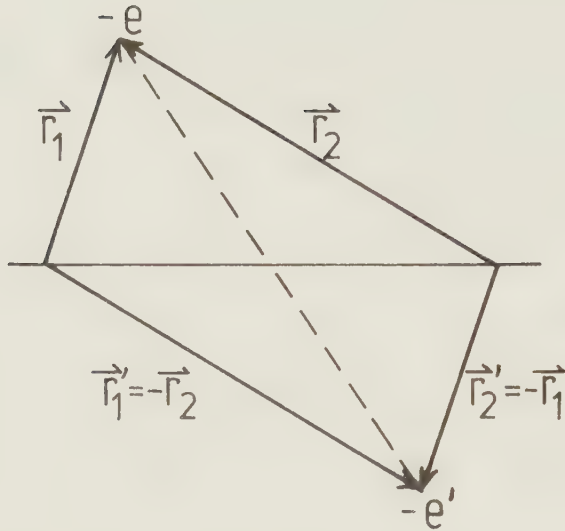
$$[\hat{H}_{TC}, \beta \hat{I}_s]_- = 0 \quad .$$

Im asymmetrischen Fall kommutiert $\beta \hat{j}_z$ ebenfalls mit $\hat{H}_{TC}$, da $\hat{j}_z$ unabhängig von der Lage des Bezugspunktes auf der z-Achse ist. Der Paritätsoperator überführt im Zweizentrensystem $\vec{r}_1$ in $-\vec{r}_2$ und $\vec{r}_2$ in $-\vec{r}_1$ (Bild 9) und kommutiert mit dem Diracoperator (1). Deshalb kann der Kommutator $[\hat{H}_{TC}, \beta \hat{I}_s]_-$ nur dann Null werden, wenn das Potential der Kerne gleich ist

$$[V_1(r_1) + V_2(r_2), \beta \hat{I}_s]_- = \beta [V_1(r_1) - V_2(r_1) + V_2(r_2) - V_1(r_2)] = 0, \quad (\text{III.3})$$

d.h., die Parität ist für asymmetrische Zweizentrensysteme keine Erhaltungsgröße.

Bild 9:



Bei der Lösung der Zweizentrendiracgleichung müssen wir zwischen symmetrischen und asymmetrischen Quasimolekülen unterscheiden. Ist $V_1(r) = V_2(r)$, dann sind die Lösungen der Zweizentrendiracgleichung Eigenfunktionen zu den Operatoren $\hat{j}_z$ und $\beta \hat{I}_s$. Es gilt

$$\beta \hat{I}_s \psi_\mu(\vec{r}) = (-1)^l \psi_\mu(\vec{r}) \quad (\text{III.4})$$

$$\hat{j}_z \psi_\mu(\vec{r}) = \mu \psi_\mu(\vec{r})$$

und wir können die Energieeigenwerte der Quasimoleküle nach den Eigenwerten dieser beiden Gleichungen klassifizieren.

Ist $(-1)^l$ ($l=0,1,2,3,\dots$) positiv, so sprechen wir von Zuständen mit positiver Parität, im anderen Fall von Zuständen mit negativer Parität. Der Eigenwert μ ist die magnetische Quantenzahl. Wir führen als Bezeichnung für $\mu = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{5}{2}, \dots$ die griechischen Buchstaben

$$\mu = \pm \sigma, \pm \pi, \pm \delta, \pm \varphi, \dots$$

ein.

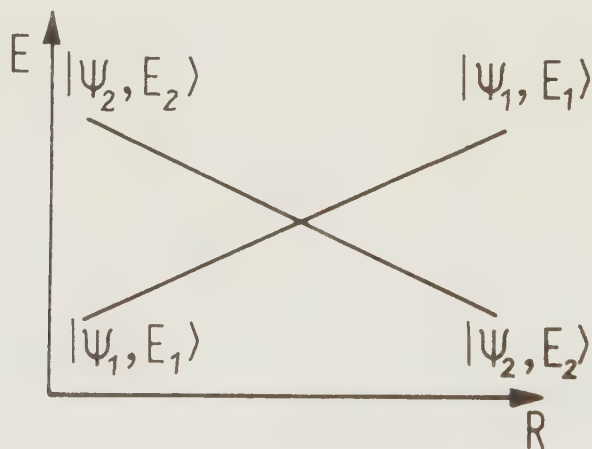
Ist $V_1(r) \neq V_2(r)$, so ist nur μ eine gute Quantenzahl.

III.2 Die verbotenen Kreuzungen

Die zeitliche, nicht für alle Zustände gleichförmige Änderung der Bindungsenergien in Quasimolekülen führt zu Niveaureuzungen. Im Bereich des diskreten Lösungsspektrums des Zweizentrendiracoperators können nur Zustände dieselbe Energie haben, die sich durch ihre Quantenzahlen unterscheiden.

Zwei Energiezustände mit unterschiedlichen "guten" Quantenzahlen dürfen sich schneiden. Die Wellenfunktionen der kreuzenden Zustände und der Verlauf des Energieniveaus beeinflussen sich gegenseitig nicht (Bild 10a).

Bild 10a:

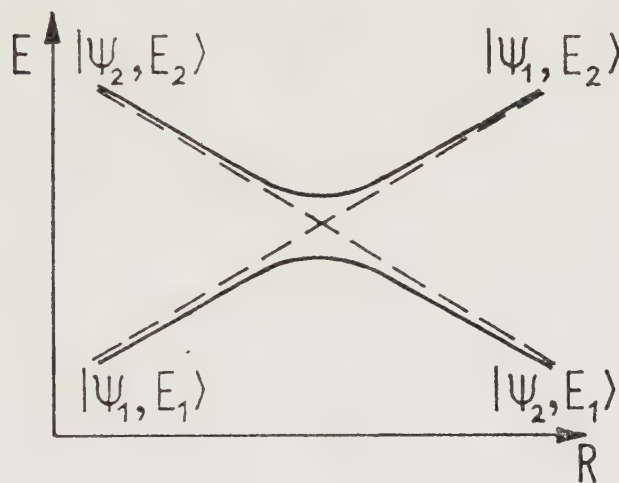


Wir sprechen hier von einer erlaubten Kreuzung. In symmetrischen Quasimolekülen dürfen sich die Energieniveaus mit unterschiedlicher Parität oder verschiedenen

magnetischen Quantenzahlen kreuzen. Bei asymmetrischen Zweizentrensystemen gilt dies nur für Zustände mit unterschiedlichen magnetischen Quantenzahlen.

Haben die sich kreuzenden Zuständen jedoch dieselben Quantenzahlen, so dürfen sich die Energieniveaus der Quasimoleküle nicht kreuzen. Die Energieniveaus "weichen sich aus". Die Wellenfunktionen der beteiligten Zustände folgen jedoch im Bereich der verbotenen

Bild 10b:



Kreuzungen nicht mehr den sich ausweichenden Energieniveaus. Vielmehr verhalten sich die Wellenfunktionen so, als ob eine erlaubte Kreuzung vorläge (Bild 10b). Während der verbotenen Kreuzung vermischen sich die Wellenfunktionen miteinander, d.h., die Hauptkomponenten der Multipolentwicklung der Wellenfunktion ψ_1 verlieren

kurzfristig ihre dominante Rolle, sie werden durch die stärksten Multipolkomponenten der Wellenfunktion ψ_2 ersetzt. Dies gilt auch umgekehrt (siehe Kapitel VI). Wir sprechen dann von einer verbotenen Kreuzung.

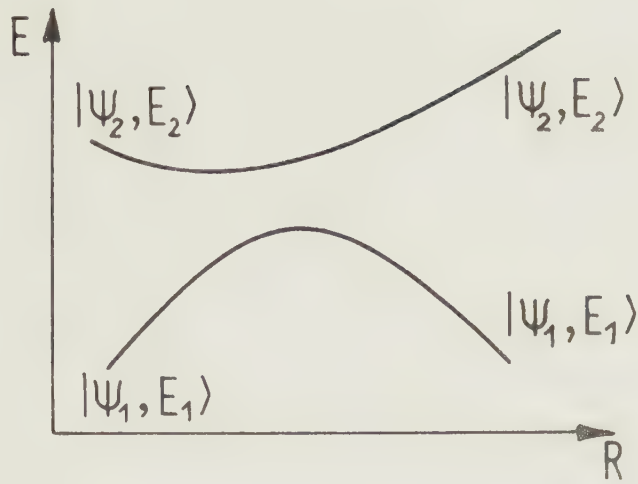
Die Veränderung der Multipolterme der Wellenfunktionen innerhalb einer verbotenen Kreuzung führt bei der Berechnung der Matrixelemente (Kapitel VII), wenn ein oder beide Zustände als Anfangs- bzw. Endzustand vorliegen, zu einer Peakstruktur im Kreuzungsgebiet.

In asymmetrischen Zweizentrensystemen hat man zuerst eine weitere Kreuzungsart der Energieniveaus beobachtet. Bei größeren Abständen R nähern sich der $1s$ und der $2p_{1/2}$ Zustand (z.B. im Pb-Cm System bei $R \sim 3200$ fm). Die Energieniveaus weichen sich aus. Es kommt zwar zu einer Vermischung der Wellenfunktionen, wie bei den verbotenen Kreuzungen, jedoch folgen die Wellenfunktionen den Energieniveaus (Bild 10c).

Wir bezeichnen diese Eigenart der Wellenfunktionen und der Energieniveaus als Pseudokreuzung.

Inzwischen haben wir auch in symmetrischen Quasimolekülen Pseudokreuzungen festgestellt⁵⁰. Im Pb-Pb System bei $R \sim 1100$ fm gibt es sowohl zwischen den $3d_{3/2}$ und $3d_{5/2}$ Zuständen als auch zwischen den beiden $4d$ Zuständen eine Pseudokreuzung.

Bild 10c:



Ein weiterer Unterschied zwischen Pseudokreuzungen und verbotenen Kreuzungen liegt in der minimalen Energiedifferenz $\Delta E_{\min}$ der Energiezustände, die bei einer Pseudokreuzung mehrere keV betragen kann.

III.3 Klassifikation adiabatischer Zustände

Es gibt nun zwei Möglichkeiten, ein und denselben Zustand eines Quasimoleküles zu klassifizieren. Die erste "Namensregel" wurde von B. Müller⁴¹ eingeführt. Die Elektronenzustände im Zweizentrensystem werden nach den Niveaus des vereinigten Systems bezeichnet. Die Klassifikation des Zustandes $|\psi_{u.a.}\rangle$ wird der Wellenfunktion zugeordnet. Verändert sich der Zweizentrenabstand, so folgt $|\psi_{u.a.}^1\rangle$ solange der Energiekurve 1, bis es zu einer verbotenen Kreuzung mit einem Zustand $|\psi_{u.a.}^2\rangle$ kommt. Im Kreuzungsbereich wechselt der Zustand $|\psi_{u.a.}^1\rangle$ die Energiekurve und folgt weiterhin der Wellenfunktion ψ_1 (Bild 10b). Dies hat zur Folge, daß der Zustand $|\psi_{u.a.}^1\rangle$ in seiner Energiekurve einen Sprung hat. Bei der Berechnung der Anregungsamplitude (I.3) müssen wir nun über diesen Energiesprung hinwegintegrieren. Bei der Lösung der stationären Zweizentren Diracgleichung sind wir davon ausgegangen, daß die radialen Komponenten $f_{\mu k}(r)$ und $g_{\mu k}(r)$ der Wellenfunktion reell sind. Diese Einschränkung führt zu einer bestimmten Phase der Wellenfunktion $\psi_{u.a.}^1$, die sich während des Stoßes nicht ändert. Die zweite "Namensregel" entspricht der Klassifikation der Elektronenzustände von Molekülen bei fixierter Lage der Kerne⁶⁹. Die in Abschnitt 1 dieses

Kapitels gefundenen "guten" Quantenzahlen symmetrischer und asymmetrischer Zweizentrensysteme werden zur Bezeichnung der Elektronenzustände herangezogen. Die Energieniveaus der Quasimoleküle mit den gleichen "guten" Quantenzahlen werden von dem am tiefsten gebundenen Zustand aufwärts der Reihe nach durchnummeriert. Bei symmetrischen Zweizentrensystemen haben wir demnach folgende Klassifikation (mit g bzw. u wird die gerade bzw. ungerade Parität des Zustandes $|\psi_{\text{mol}}\rangle$ bezeichnet)

$1\Sigma_g$	$1\Sigma_u$	$1\pi_g$	$1\pi_u$	$1\Lambda_g$	$1\Lambda_u$	$1\phi_g$	$1\phi_u$	$1\Gamma_g$	...
$2\Sigma_g$	$2\Sigma_u$	$2\pi_g$	$2\pi_u$	$2\Lambda_g$	$2\Lambda_u$	$2\phi_g$	$2\phi_u$	$2\Gamma_g$	
$3\Sigma_g$	$3\Sigma_u$	$3\pi_g$	$3\pi_u$	$3\Lambda_g$	$3\Lambda_u$	...			

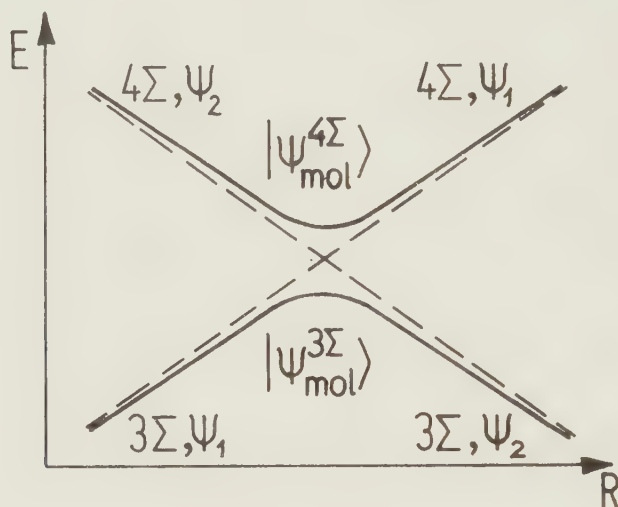
Da die Parität für asymmetrische Quasimoleküle keine Erhaltungsgröße ist, ergeben sich folgende Bezeichnungen

1Σ	1π	1Λ	
2Σ	2π	2Λ	u.s.w.
3Σ	3π	3Λ	

Betrachten wir wieder eine verbotene Kreuzung (Bild 11). Die Klassifikation der Zustände $|\psi_{\text{mol}}\rangle$ folgt den Energieniveaus auch während der verbotenen Kreuzungen. Dadurch

weisen die Zustände $|\varphi_{\text{mol}}\rangle$ keine Energiesprünge auf, jedoch verändert sich im Kreuzungsbereich die Wellenfunktion des Zustandes $|\varphi_{\text{mol}}\rangle$.

Bild 11:



Leider können wir ohne detaillierte Untersuchungen an den Kreuzungen von vornherein keine Aussage über das Phasenverhalten der Zustände $|\varphi_{\text{mol}}\rangle$ abgeben, da durch die Änderung der Wellenfunktion im Gebiet einer verbotenen Kreuzung sich die Phase des Zustandes $|\varphi_{\text{mol}}\rangle$ ändern kann. Wollen wir zur Berechnung der Anregungsamplitude (I.3) die Klassifikation nach den Erhaltungsgrößen der Zweizentrensysteme verwenden, so müssen wir an jeder verbotenen Kreuzung überprüfen, ob sich die Phase des Zustandes $|\varphi_{\text{mol}}\rangle$ geändert hat oder nicht. Im Pb-Cm-System z.B. gibt es zwischen $R=16$ fm und $R=3000$ fm, wenn wir nur die 21 niedrigsten Σ und π Zustände berücksichtigen, ca. 23 Niveaure Kreuzungen, an denen jeweils zwei Zustände

beteiligt sind. Wir müßten somit 46 Phasenstudien vornehmen. Keine der beiden in diesem Abschnitt diskutierten Klassifikationen der Elektronenzustände in Quasimolekülen ist optimal. Je nach dem, was wir bei der Untersuchung der Quasimoleküle hervorheben wollen, werden wir die eine oder andere Nomenklatur bevorzugen.

III.4 Phasenbestimmung molekularer Wellenfunktionen

Für jede einzelne verbotene Kreuzung soll die Phase der beteiligten Zustände $|\psi_{\text{mol}}\rangle$ getrennt untersucht werden. Wir gehen von der Ableitung der Zweizentrenwellenfunktionen aus. Seien $\psi(R_1)$, $\psi(R_2)$, $\psi(\tilde{R})$ die Wellenfunktionen desselben Zustandes $|\psi_{\text{mol}}\rangle$ bei verschiedenen Zweizentrenabständen, R_1 , R_2 und $\tilde{R} = \frac{R_1+R_2}{2}$. Der Differenzenquotient der Wellenfunktionen $\psi(R_1)$, $\psi(R_2)$ hat zwei mögliche Lösungen

$$\frac{\psi(R_1) - \psi(R_2)}{R_1 - R_2} = \begin{cases} \frac{2 \psi(\tilde{R})}{\Delta R} \\ 0 \end{cases} \quad (\text{III.5})$$

Die erste Lösung zeigt eine Phasenänderung des Zustandes $|\psi_{\text{mol}}\rangle$ an. Im zweiten Fall gibt es keinen Phasensprung. Multiplizieren wir Gleichung (5) von links mit $\psi(R_1)$ und integrieren anschließend, so erhalten wir

$$\langle \psi(R_1) | \frac{\psi(R_1) - \psi(R_2)}{\Delta R} \rangle = \begin{cases} \frac{2}{\Delta R} \langle \psi(R_1) | \psi(\tilde{R}) \rangle \\ 0 \end{cases} \quad (\text{III.6})$$

bzw.

$$\langle \psi(R_1) | \psi(R_1) \rangle - \langle \psi(R_1) | \psi(R_2) \rangle = \begin{cases} 2 \langle \psi(R_1) | \psi(R) \rangle \\ 0 \end{cases} \quad (\text{III.7})$$

Nehmen wir weiterhin an, daß $\psi(R_1) \sim \psi(\tilde{R})$ ist, so erhalten wir infolge der Normierung der Wellenfunktionen

$$\langle \psi(R_1) | \psi(R_1) \rangle = 1, \quad \langle \psi(R_1) | \psi(\tilde{R}) \rangle = 1$$

$$\frac{1}{2} (1 - \langle \psi(R_1) | \psi(R_2) \rangle) \sim \begin{cases} 1 & \text{(Phasensprung)} \\ 0 & \text{(kein Phasensprung)} \end{cases} \quad (\text{III.8})$$

Der Überlapp der Wellenfunktionen eines Zustandes an den beiden Abständen R_1 und R_2 ist ein direktes Maß für eine Phasenänderung. Sind die Vorzeichen der Wellenfunktionen $\psi(R_1)$ und $\psi(R_2)$ identisch, so liefert der Ausdruck Null. Sind die Vorzeichen von $\psi(R_1)$ und $\psi(R_2)$ verschieden, so erhalten wir als Ergebnis 1. Ist die Differenz $\Delta R > 20$ fm, so ist es verständlich, daß wir nicht exakt Null oder Eins erhalten. Verringern wir ΔR , so kommen wir immer näher an die Abschätzung heran.

Ändert sich bei einem Zustand $|\psi_{\text{mol}}\rangle$ die Phase, so wird ab dem Abstand R_2 die betreffende Wellenfunktion mit -1 multipliziert. Es kann vorkommen, daß ein Zustand mehrere verbotene Kreuzungen durchläuft (z.B. der 7Σ -Zustand des Pb-Cm-Systems (Bild 33)) und die Phase sich mehrmals ändert, dann wird bei jedem Phasenwechsel die dazugehörige Wellenfunktion mit -1 zu multiplizieren sein.

IV. Diskussion der Korrelationsdiagramme

Wir analysieren in diesem Kapitel ausführlich die relativistischen Korrelationsdiagramme des symmetrischen Pb-Pb und des asymmetrischen Pb-Cm-Systems. Neben der starken relativistischen Aufspaltung zwischen den $p_{\frac{3}{2}}^{\frac{1}{2}}$ und $p_{\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}$ Zuständen bei kleinen Abständen, werden wir eingehend die verbotenen Niveaureuzungen untersuchen. Ein charakteristisches Merkmal superschwerer Quasimoleküle ist die drastische Energieänderung der am stärksten gebundenen Zustände, die wir zwischen $R=15\text{ fm}$ und $R=100\text{ fm}$ beobachten werden. Die Unterschiede der Energieeigenwerte im Felde zweier Punktkerne oder ausgedehnte Kerne werden dargelegt. Um die relativistischen Effekte superschwerer Quasimoleküle besser hervorheben zu können, vergleichen wir die gewonnenen Resultate mit dem leichteren Nb-Nb-Quasimolekül. Weitere Korrelationsdiagramme superschwerer asymmetrischer Quasimoleküle werden vorgestellt (U-Cm, Pb-Cf, U-Cf). Ab einer Gesamtladung des vereinigten Zweizentrensystems von $Z_{u.a.} \sim 170$ kann der $1s^{\frac{1}{2}}$ Zustand bei einem kritischen Zweizentrenabstand in das negative Kontinuum eintauchen. Dies gilt ebenfalls für den $2p_{\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}$ Zustand ab $Z_{u.a.} \sim 184$. Die kritischen Abstände dieser beiden Niveaus im Felde zweier Punktkerne bzw. ausgedehnter Kerne werden für unterschiedliche Quasimoleküle angegeben. Die durch die Monopolnäherung gewonnenen Energieeigenwerte werden mit den exakten Lösungen der Zweizentren-Diracgleichung verglichen.

IV.1 Symmetrische Zweizentrensysteme

Als Beispiel eines relativistischen Korrelationsdiagrammes zeigen wir in den Bildern 12 die Bindungsenergien einiger gebundener Zustände des Pb-Pb-Systems in unterschiedlichen Darstellungen. Damit wollen wir das

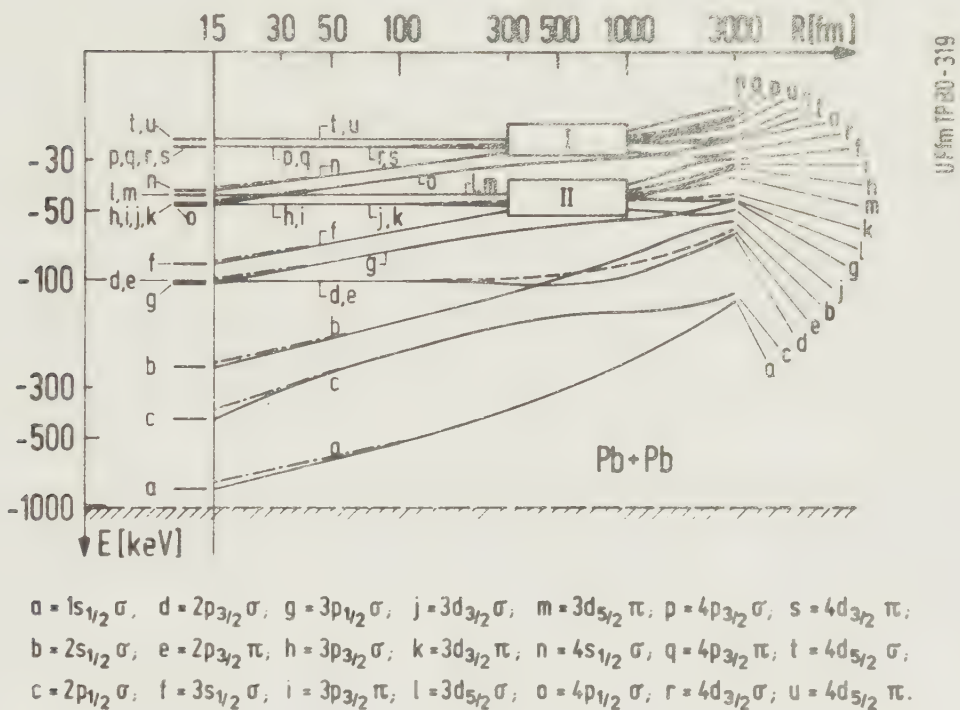


Bild 12a: Das relativistische Korrelationsdiagramm für das quasimolekulare Pb-Pb-System in doppellogarithmischer Darstellung⁵⁰. Aufgetragen sind in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand R die Bindungsenergien der untersten σ - (durchgezogen) und π - (gestrichelt) Zuständen. Die strichpunktuierten Linien geben die entsprechenden Energien für ausgedehnte Kerne wieder

verschiedenartige Verhalten der Energieeigenwerte in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand R hervorheben. Wir klassifizieren die quasimolekularen Zustände nach den Bezeichnungen der Elektronenniveaus des vereinigten Zweizentrensystems. Den Energienullpunkt legen wir bei allen nun folgenden Energiekorrelationsdiagrammen an das positive Kontinuum.

In Bild 12a zeigen wir die 21 niedrigsten ν - und π -Elektronenniveaus in einer doppellogarithmischen Darstellung zwischen $R=15\text{fm}$ und $R=3000\text{fm}$. Charakteristisch für die relativistischen Korrelationsdiagramme sind die relativistischen Aufspaltungen zwischen den $p_{\frac{3}{2}}^{\nu}$ - und $p_{\frac{1}{2}}^{\nu}$ -Zuständen. In Tabelle 3 sind die Zahlenwerte aufgelistet.

Tabelle 3: Relativistische Aufspaltung des Pb-Pb-Quasimoleküls bei $R=15\text{fm}$

	Punktkerne	ausgedehnte Kerne
	$\Delta E(\text{keV})$	$\Delta E(\text{keV})$
$2p_{\frac{3}{2}}^{\nu} - 2p_{\frac{1}{2}}^{\nu}$	316,54	271,70
$3p_{\frac{3}{2}}^{\nu} - 3p_{\frac{1}{2}}^{\nu}$	59,51	54,21
$4p_{\frac{3}{2}}^{\nu} - 4p_{\frac{1}{2}}^{\nu}$	21,01	19,33

Eine Folge dieser starken Aufspaltungen sind bei Punktkernrechnungen die verbotenen Kreuzungen zwischen dem $3p_{\frac{1}{2}}^{\pi}$ und $2p_{\frac{3}{2}}^{\pi}$ Zustand bei 18fm und dem $4p_{\frac{1}{2}}^{\pi}$ und $3p_{\frac{3}{2}}^{\pi}$ Zustand bei 15,5fm. Die Energieniveaus in den Rechtecken I und II zwischen 300 und 1000 fm werden in den Bildern 12b und 12 c in linearem Maßstab gezeigt. Es fallen sofort die verbotenen Kreuzungen zwischen dem $4s^{\pi}$ und $4d_{\frac{3}{2}}^{\pi}$ bei 400 fm und $4s^{\pi}$ und $4d_{\frac{5}{2}}^{\pi}$ bei 625fm in Bild 12b auf. Die Wechselwirkung zwischen den $4s^{\pi}$ und $4d_{\frac{3}{2}}^{\pi}$ Zuständen ist viel größer als zwischen dem $4s^{\pi}$ und $4d_{\frac{5}{2}}^{\pi}$ Niveaus. Wir finden für die verbotenen Kreuzungen bei $R=400$ fm eine minimale Energiedifferenz von $E=0.35\text{keV}$ und bei $R=625$ fm $\Delta E=0,03\text{keV}$. Weiterhin bemerken wir, daß der $4p_{\frac{3}{2}}^{\pi}$ Zustand bei $R=425\text{fm}$ ein Energieminimum hat. Die Elektronenzustände in Bild 12c zeigen ein äquivalentes Verhalten, wie wir es bei Bild 12b beschrieben haben. Die verbotene Kreuzung zwischen den $3s_{\frac{1}{2}}^{\pi}$ und $3d_{\frac{3}{2}}^{\pi}$ Zuständen bei $R=425\text{fm}$ haben eine minimale Energiedifferenz von $\Delta E=0,75\text{keV}$. Die zweite verbotene Kreuzung in Bild 12c hat zwischen den $3s_{\frac{1}{2}}^{\pi}$ und $3d_{\frac{5}{2}}^{\pi}$ Zuständen bei $R=640\text{fm}$ den kleinsten Energieabstand $\Delta E=0,05\text{keV}$. In Tabelle 4 haben wir alle verbotenen Kreuzungen des Pb-Pb-Systems zusammengestellt, die im Bereich $15\text{fm} \leq R \leq 3000\text{fm}$ für die 21 niedrigsten π - und π -Zuständen auftreten.

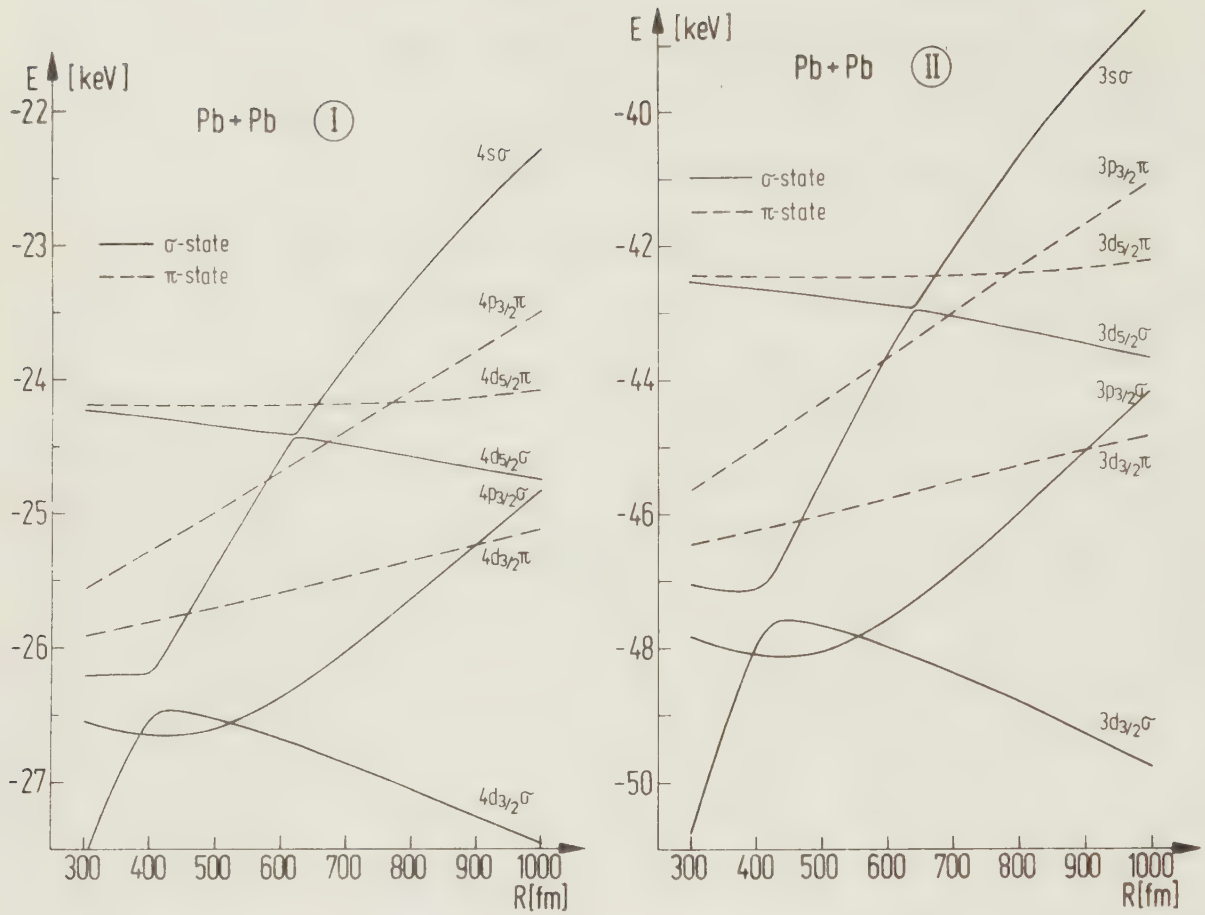


Bild 12 b,c: Ausschnitte aus dem Korrelationsdiagramm 12a.

Die durch Rechtecke ausgesparten Energieniveaus sind in einem linearen Maßstab aufgezzeichnet worden. Die durchgezogenen Linien entsprechen den σ - , die gestrichelten Linien den π -Zuständen.

Wir geben hier die beteiligten Zuständen, den Zweizentrenabstand der Kreuzung und die minimale Energiedifferenz wieder.

Tabelle 4: Niveaure Kreuzungen im Pb-Pb-Quasimolekül zwischen $R=15\text{fm}$ und $R=3000\text{fm}$ für ausgedehnte Kerne.

Zustände , die kreuzen	Abstand [fm]	minimale Energiedifferenz ΔE [keV]
$4s_{\frac{1}{2}} - 4d_{\frac{3}{2}}^{\frac{3}{2}}$	400	0,35
$3s_{\frac{1}{2}} - 3d_{\frac{3}{2}}^{\frac{3}{2}}$	425	0,75
$4s_{\frac{1}{2}} - 4d_{\frac{5}{2}}^{\frac{5}{2}}$	625	0,03
$3s_{\frac{1}{2}} - 3d_{\frac{5}{2}}^{\frac{5}{2}}$	640	0,05

Neben den vier verbotenen Kreuzungen können wir auch auf vier Pseudokreuzungen (Kapitel III.2) hinweisen (Tabelle 5)

Tabelle 5: Pseudokreuzungen in Pb-Pb-Quasimolekülen zwischen $R=15\text{fm}$ und $R=3000\text{fm}$ für ausgedehnte Kerne

Zustände	Abstand [fm]	minimale Energiedifferenz [keV]
$3d_{\frac{3}{2}}^{\frac{3}{2}} - 3d_{\frac{5}{2}}^{\frac{5}{2}}$	1100	2,6
$4d_{\frac{3}{2}}^{\frac{3}{2}} - 4d_{\frac{5}{2}}^{\frac{5}{2}}$	1150	1,0
$2s_{\frac{1}{2}} - 3d_{\frac{3}{2}}^{\frac{3}{2}}$	2400	0,48
$3s_{\frac{1}{2}} - 4d_{\frac{3}{2}}^{\frac{3}{2}}$	2500	1,28

Ein weiteres typisches Merkmal relativistischer Korrelationsdiagramme ist die drastische Energieänderung der am stärksten gebundenen Zustände im Bereich der kleinsten Annäherung der Ionen. In Bild 12d haben wir deshalb die Abhängigkeit der unteren Energieniveaus vom Zweizentren-

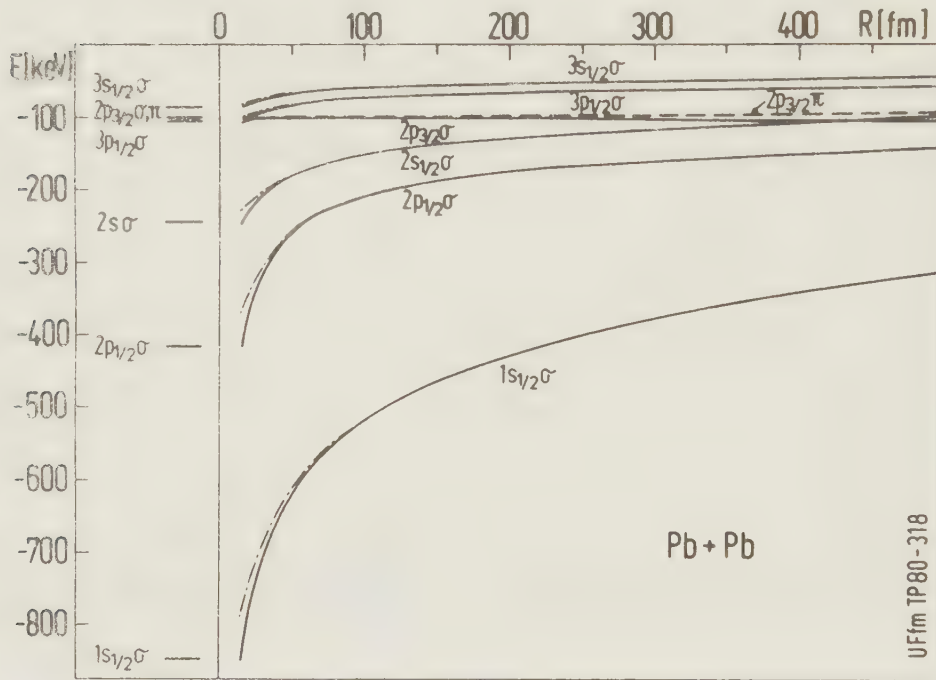


Bild 12d: Die Bindungsenergien der am stärksten gebundenen Zustände in einer linearen Skala.

abstand im linearen Maßstab aufgezeichnet. In Tabelle 6 geben wir die Energieabsenkung sowohl in keV als auch in Prozent (bezogen auf $R=15\text{fm}$) zwischen den Abständen $R=15\text{fm}$ - $R=100\text{fm}$ wieder.

Tabelle 6: Energieänderung der Zustände zwischen den Abständen 15fm-100fm des Pb-Pb-Quasimoleküles

Zustand	Punktkerne		ausgedehnte Kerne	
	keV	%	keV	%
$1s\frac{1}{2}\sigma$	329,87	38,8	272,72	34,47
$2s\frac{1}{2}\sigma$	90,63	37,0	76,17	33,1
$2p\frac{1}{2}\sigma$	207,27	49,6	162,88	43,63
$3s\frac{1}{2}\sigma$	24,34	28,1	20,67	25,0
$3p\frac{1}{2}\sigma$	32,23	30,3	27,03	26,8
$4s\frac{1}{2}\sigma$	8,91	21,7	7,64	19,2
$4p\frac{1}{2}\sigma$	10,61	22,6	9,01	19,9

Wie wir aus der Tabelle 6 ablesen können, verliert am meisten der $2p\frac{1}{2}\sigma$ Zustand innerhalb einer Abstandsänderung von 85fm 49,6% (43,6%) seiner Bindungsenergie.

Lösen wir die Zweizentrendiracgleichung für Punktkerne und ausgedehnte Kerne, so ist der Energieunterschied für denselben Zustand um so größer, je kleiner der Zweizentrenabstand ist. Je geringer der Abstand um so stärker werden die Elektronen gebunden, desto näher ist ihre maximale Aufenthaltswahrscheinlichkeit an den beiden Kernen, um so mehr werden die Elektronen von der räumlichen Struktur beeinflusst. Bei $R \sim 150\text{fm}$ gehen die Punktkernlösungen bei superschweren Quasimolekülen in die der Lösungen für ausgedehnte Kerne über.

Bei leichten Zweizentrensystemen (z.B. Nb-Nb) sind auch für kleine Abstände Punktkern- und ausgedehnte Kernrechnungen identisch, da die Elektronen nicht so stark gebunden sind. Um den schnell fallenden Einfluß ausgedehnter Kerne auf die Energieeigenwerte schwerer Quasimoleküle zu zeigen, haben wir in Tabelle 7 für das Pb-Pb-System die Energiedifferenzen zwischen Punktkern- und ausgedehnten Kernpotentialen einiger gebundener Zustände an den beiden Abständen $R=15\text{fm}$ und $R=100\text{fm}$ aufgelistet. Die Tabelle zeigt uns, daß ab der M-Schale schon bei $R=100\text{fm}$ die Energiewerte für Punktkerne und ausgedehnte Kerne der Quasimoleküle praktisch identisch sind.

Tabelle 7: Energiedifferenz der Quasimoleküle mit Punktkern- und ausgedehntem Kernpotential bei $R=15\text{fm}$ und $R=100\text{fm}$

Zustand	$\Delta E(\text{keV}), R=15\text{fm}$	$E(\text{keV}), R=100\text{fm}$
$1s_{\frac{1}{2}}$	58,16	1,01
$2s_{\frac{1}{2}}$	13,93	0,28
$2p_{\frac{1}{2}}$	44,84	0,45
$3s_{\frac{1}{2}}$	3,74	0,08
$3p_{\frac{1}{2}}$	5,30	0,10
$4s_{\frac{1}{2}}$	1,31	0,03
$4p_{\frac{1}{2}}$	1,64	0,03

Um den Unterschied zwischen dem relativistischen symmetrischen Korrelationsdiagramm des Pb-Pb-Systems und einem Energiediagramm eines leichten Quasimoleküles aufzuzeigen, wählen wir als Beispiel das Nb-Nb-System⁷⁰. In Bild 13 sind die 14 niedrigsten σ -(durchgezogene Linien) und π -(gestrichelte Linien) Zustände in einer

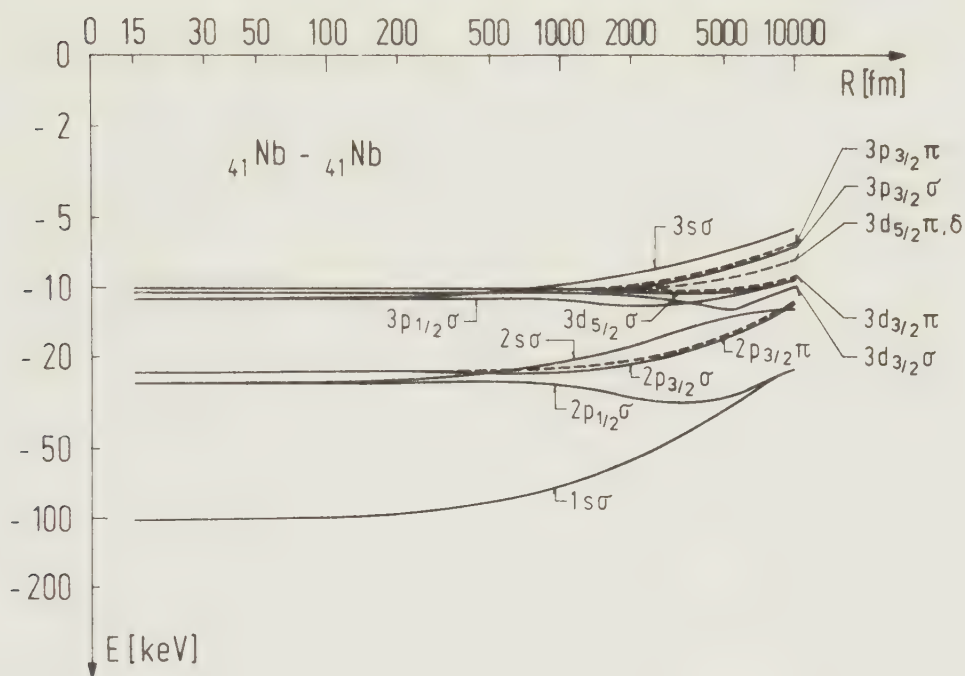


Bild 13: Das Korrelationsdiagramm für das quasimolekulare Nb-Nb-System in einer doppellogarithmischen Darstellung⁷⁰. Aufgetragen sind in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand R die Bindungsenergien der untersten σ -(durchgezogen) und π -(gestrichelt) Zustände.

doppellogarithmischen Darstellung im Bereich $R=15\text{fm}$ bis $R=10000\text{ fm}$ gezeichnet worden. Ebenso wie im Pb-Pb-System ist im Nb-Nb-System die Entartung zwischen den $s_{\frac{1}{2}}^{\uparrow}$ und $p_{\frac{1}{2}}^{\uparrow}$ Zuständen aufgehoben. Der Energieunterschied ist jedoch sehr klein. Bei einem Abstand von $R=15\text{fm}$ finden wir für die Niveaus $2s_{\frac{1}{2}}^{\uparrow} - 2p_{\frac{1}{2}}^{\uparrow}$ $\Delta E=17\text{eV}$ und $3s_{\frac{1}{2}}^{\uparrow} - 3p_{\frac{1}{2}}^{\uparrow}$ $\Delta E=5\text{eV}$. Die relativistische Aufspaltung zwischen den $p_{\frac{1}{2}}^{\uparrow}$ und $p_{\frac{3}{2}}^{\uparrow}$ Zuständen ist viel geringer als im Pb-Pb-System. Wir finden bei $R=15\text{fm}$ eine Energiedifferenz von $\Delta E=2,65\text{keV}$ ($\Delta E=0,79\text{keV}$) zwischen den $2p_{\frac{1}{2}}^{\uparrow} - 2p_{\frac{3}{2}}^{\uparrow}$ ($3p_{\frac{1}{2}}^{\uparrow} - 3p_{\frac{3}{2}}^{\uparrow}$) Zuständen. Für die 14 niedrigsten $\uparrow$ - und $\downarrow$ -Zustände haben wir nur zwei verbotene Kreuzungen gefunden. Die beteiligten Zustände sind: $3s_{\frac{1}{2}}^{\uparrow} - 3d_{\frac{3}{2}}^{\uparrow}$ ($R=490\text{fm}$) und $3s_{\frac{1}{2}}^{\downarrow} - 3d_{\frac{5}{2}}^{\downarrow}$ ($R=650\text{fm}$). Bei $R=5200\text{fm}$ liegt zwischen den Zuständen $2s_{\uparrow} - 3d_{\frac{3}{2}}^{\uparrow}$ eine Pseudokreuzung vor.

In Bild 13 fallen noch die ausgeprägten Minima der $2p_{\frac{1}{2}}^{\uparrow}$ und $3p_{\frac{1}{2}}^{\uparrow}$ Niveaus bei einem Abstand von $R=3500\text{fm}$ und $R=2600\text{fm}$ auf. Ab einem Zweizentrenabstand von 8500fm wird der Energieunterschied zwischen den Zuständen $1s_{\frac{1}{2}}^{\uparrow}$ und $2p_{\frac{1}{2}}^{\uparrow}$ immer geringer. Dies ist verständlich, denn für $R \rightarrow \infty$ sind beide Zustände entartet. Sie gehen in die beiden $1s$ -Niveaus der Einzelatome über. Die minimale Energieänderung bei kleinen Abständen (bis ca. 200fm) ist in der Literatur als runway-Effekt bekannt.

IV.2 Die asymmetrischen Zweizentrensysteme

Zur Beschreibung asymmetrischer Zustände haben wir nur eine gute Quantenzahl zur Verfügung, die magnetische Quantenzahl μ . Dadurch erhöht sich bei gleichen Voraussetzungen die Anzahl der verbotenen Kreuzungen gegenüber den symmetrischen Systemen. Zur genaueren Analyse der Abhängigkeit der Bindungsenergien vom Zweizentrenabstand haben wir wieder unterschiedliche Darstellungen des Pb-Cm-Korrelationsdiagrammes gewählt⁵⁴. In Bild 14a sind die 21 niedrigsten σ -(durchgezogene Linien) und π -(gestrichelte Linien) in einer doppellogarithmischen Zeichnung zwischen $R=16\text{fm}$ und $R=3000\text{fm}$ dargestellt. Die strichpunktierten Linien geben die entsprechenden Energien für ausgedehnte Kerne wieder. Die relativistische Aufspaltung zwischen den $p_{\frac{3}{2}}^{\sigma}$ und $p_{\frac{1}{2}}^{\sigma}$ Zuständen hat im Vergleich zum Pb-Pb-System zugenommen, da die Kernladung des Quasiatomes $Z_{\text{u.a.}}=82+96=178$ größer als $Z_{\text{u.a.}}=82+82=164$ ist (Tabelle 8). Beachtlich ist die Aufspaltung zwischen den $2p_{\frac{3}{2}}^{\sigma}$ und $2p_{\frac{1}{2}}^{\sigma}$ Zuständen, die mehr als eine Elektronenmasse beträgt.

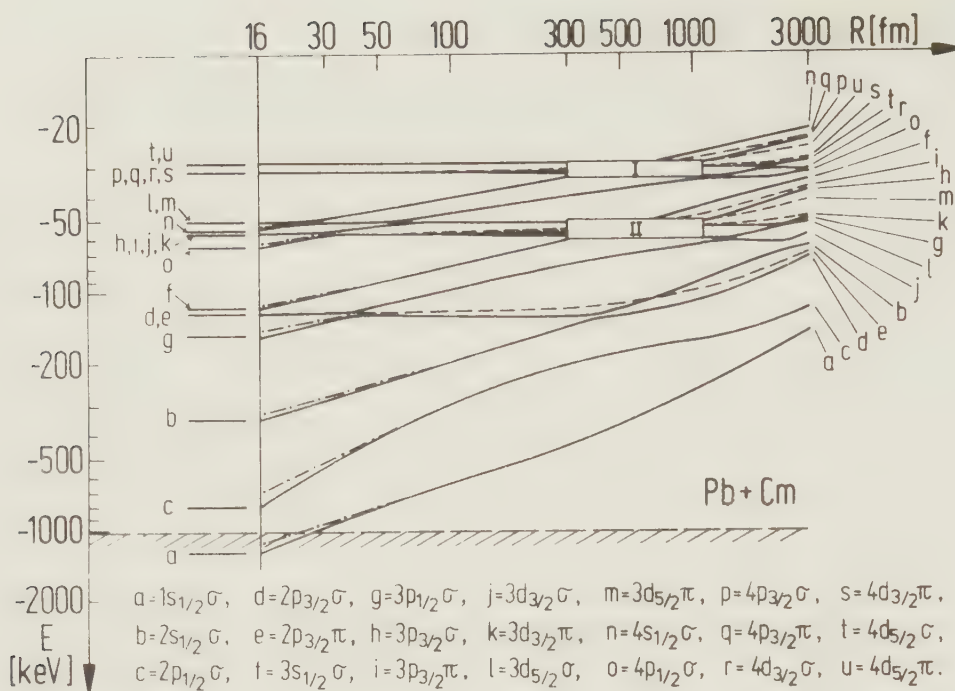


Bild 14a: Das relativistische Korrelationsdiagramm des superschweren Quasimoleküles Pb-Cm in einer doppellogarithmischen Darstellung. Aufgetragen sind in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand R die Bindungsenergien der 21 niedrigsten σ - (durchgezogene Linien) und π - (gestrichelte Linien) Zuständen. Die strichpunktierten Linien geben die entsprechenden Energien für ausgedehnte Kerne wieder. Bei $R_{\text{krit}} = 24,0 \text{ fm}$ taucht der $1s\sigma$ -Zustand in das negative Kontinuum ein.

Tabelle 8: Relativistische Aufspaltung zwischen den $p_{\frac{3}{2}} - p_{\frac{1}{2}}$ Zuständen des Pb-Cm-Quasimoleküls bei $R=16\text{fm}$

	Punktkerne	ausgedehnte Kerne
	$\Delta E(\text{keV})$	$\Delta E(\text{keV})$
$2p_{\frac{3}{2}} - 2p_{\frac{1}{2}}$	687,77	565,99
$3p_{\frac{3}{2}} - 3p_{\frac{1}{2}}$	100,36	90,04
$4p_{\frac{3}{2}} - 4p_{\frac{1}{2}}$	33,50	30,55

Die in Bild 14a durch rechteckige Kästchen gekennzeichneten ausgesparten Energieniveaus sind in den Bildern 14b,c in einem linearen Maßstab vergrößert gezeichnet. Auffallend sind in beiden Figuren bei ca. 400fm die gleichzeitige Kreuzung dreier Zustände ($3s$, $3p_{\frac{3}{2}}$, $3d_{\frac{3}{2}}$ in Bild 14c, $4s$, $4p_{\frac{3}{2}}$, $4d_{\frac{3}{2}}$ in Bild 14b). Der $3p_{\frac{3}{2}}$ ($4p_{\frac{3}{2}}$) Zustand schlängelt sich durch die beiden anderen Niveaus $3s$ ($4s$) und $3d_{\frac{3}{2}}$ ($4d_{\frac{3}{2}}$) durch. Vergleichen wir denselben Figurenausschnitt im Pb-Pb-System (Bild 12b,c), so gibt es dort zwei erlaubte Kreuzungen zwischen dem $3p_{\frac{3}{2}}$ ($4p_{\frac{3}{2}}$) Zustand und den $3s$ ($4s$) und $3d_{\frac{3}{2}}$ ($4d_{\frac{3}{2}}$) Zuständen. Die erlaubten Kreuzungen im Pb-Pb-Quasimoleküle zwischen den $3p_{\frac{3}{2}}\pi$ ($4p_{\frac{3}{2}}\pi$) und $3d_{\frac{5}{2}}\pi$ ($4d_{\frac{5}{2}}\pi$) Niveaus (Bild 12 b,c) sind im asymmetrischen Pb-Cm-System verboten. Ebenso verhält es sich mit den Kreuzungen zwischen den Zuständen $3d_{\frac{5}{2}}$ ($4d_{\frac{5}{2}}$) und $3p_{\frac{3}{2}}$ ($4p_{\frac{3}{2}}$).

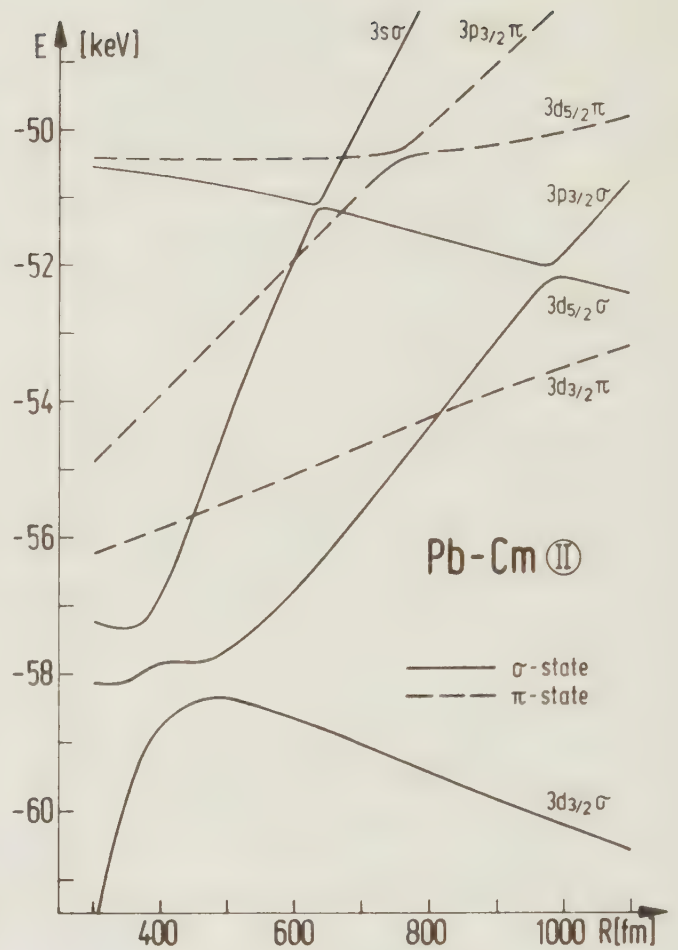
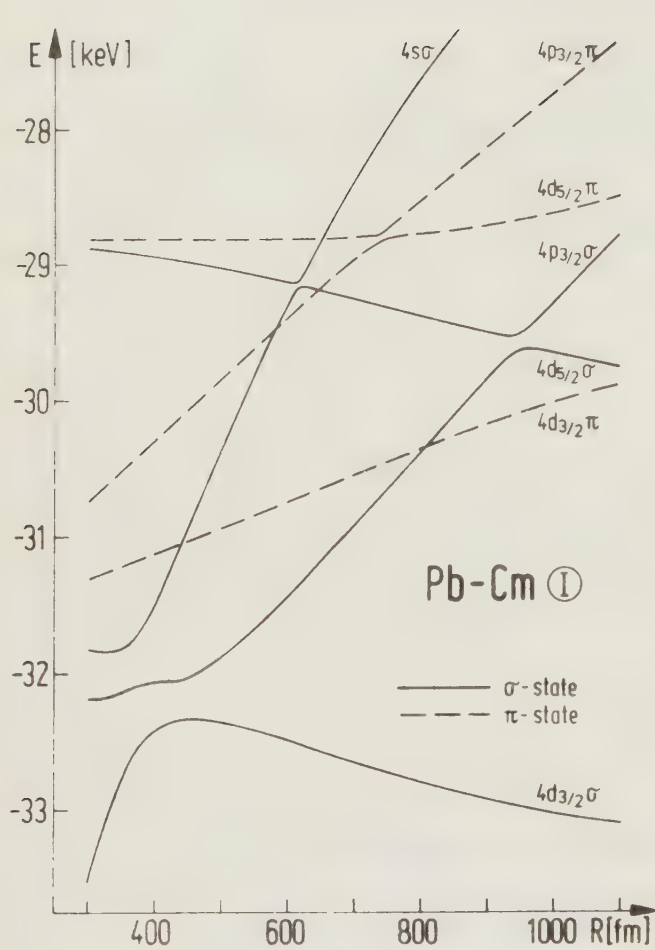


Bild 14 b,c: Die Ausschnitte I und II aus dem Korrelationsdiagramm 14a. Die durch Rechtecke ausgesparten Energieniveaus sind in einem linearen Maßstab aufgezeichnet worden. Die durchgezogenen Linien entsprechen den σ - die gestrichelten Linien den π -Zuständen.

Charakteristisch für asymmetrische Quasimoleküle sind die vielen verbotenen Kreuzungen, die wir in Tabelle 9 zusammengestellt haben.

Tabelle 9: Niveaure Kreuzungen im Pb-Cm-Quasimolekül zwischen $R=16\text{fm}$ und $R=3000\text{fm}$ für ausgedehnte Kerne. Die mit einem * versehenen Kreuzungen sind Pseudokreuzungen.

Zustände die kreuzen	Abstand (fm)	Zustände die kreuzen	Abstand (fm)
$4s_{\frac{1}{2}} \sigma - 3d_{\frac{5}{2}} \sigma$	23	$4p_{\frac{3}{2}} \pi - 4d_{\frac{5}{2}} \pi$	740
$4p_{\frac{1}{2}} \sigma - 3p_{\frac{3}{2}} \sigma$	31	$3p_{\frac{3}{2}} \pi - 3d_{\frac{5}{2}} \pi$	760
$4p_{\frac{1}{2}} \sigma - 3d_{\frac{3}{2}} \sigma$	32	$4p_{\frac{3}{2}} \sigma - 4d_{\frac{5}{2}} \sigma$	950
$3p_{\frac{1}{2}} \sigma - 2p_{\frac{3}{2}} \sigma$	43	$3p_{\frac{3}{2}} \sigma - 3d_{\frac{5}{2}} \sigma$	980
$4p_{\frac{1}{2}} \sigma - 3d_{\frac{5}{2}} \sigma$	63	$4p_{\frac{3}{2}} \sigma - 4d_{\frac{3}{2}} \sigma$	1250
$3d_{\frac{3}{2}} \sigma - 3p_{\frac{3}{2}} \sigma$	350	$3p_{\frac{3}{2}} \sigma - 3d_{\frac{3}{2}} \sigma$	1260
$4d_{\frac{3}{2}} \sigma - 3p_{\frac{3}{2}} \sigma$	350	$4p_{\frac{1}{2}} \sigma - 4d_{\frac{5}{2}} \sigma$	2100
$3s_{\frac{1}{2}} \sigma - 3p_{\frac{1}{2}} \sigma$	400	$3p_{\frac{1}{2}} \sigma - 3d_{\frac{5}{2}} \sigma$	2400
$4s_{\frac{1}{2}} \sigma - 4p_{\frac{3}{2}} \sigma$	400	$4p_{\frac{1}{2}} \sigma - 4d_{\frac{3}{2}} \sigma$	2950
$3s_{\frac{1}{2}} \sigma - 3d_{\frac{3}{2}} \sigma$	400		
$4s_{\frac{1}{2}} \sigma - 4p_{\frac{3}{2}} \sigma$	400		
$2s_{\frac{1}{2}} \sigma - 2p_{\frac{3}{2}} \sigma$	420	$4d_{\frac{3}{2}} \pi - 4d_{\frac{5}{2}} \pi^*$	1100
$3s_{\frac{1}{2}} \sigma - 3d_{\frac{5}{2}} \sigma$	615	$3d_{\frac{3}{2}} \pi - 3d_{\frac{5}{2}} \pi^*$	1150
$4s_{\frac{1}{2}} \sigma - 4d_{\frac{5}{2}} \sigma$	635	$2s_{\frac{1}{2}} \sigma - 3d_{\frac{3}{2}} \sigma^*$	2500
		$3s_{\frac{1}{2}} \sigma - 4d_{\frac{3}{2}} \sigma^*$	2600
		$1s_{\frac{1}{2}} \sigma - 2p_{\frac{1}{2}} \sigma^*$	3200

Je größer die Kernladung des vereinigten Systems ist, desto stärker sind die relativistischen Effekte. Zu ihnen zählt die Energieänderung bei kleinen Zweizentrenabständen. In Bild 14d sind zur besseren Darstellung

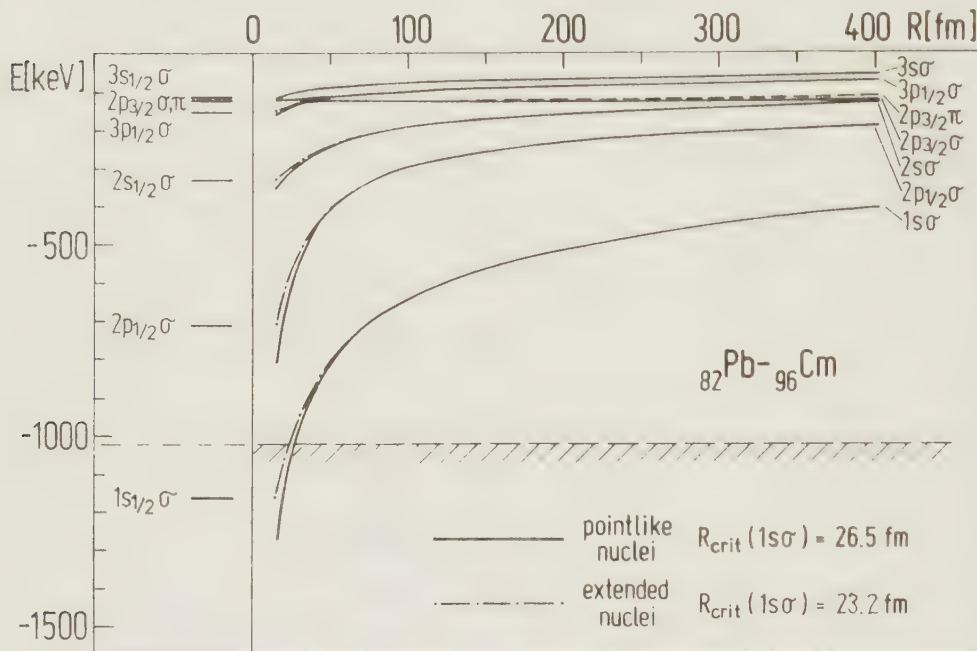


Bild 14d: Das Korrelationsdiagramm des superschweren Quasimoleküls Pb-Cm. Es wurden für kleine Zweizentrenabstände $R < 400$ fm die Energien der 7 tiefsten gebundenen Niveaus in linearem Maßstab aufgezeichnet. Der $1s\sigma$ -Zustand taucht bei $R_{\text{krit}} = 23,2$ fm in das negative Kontinuum ein.

dieser Energieänderung die Energien der am stärksten gebundenen Zustände zwischen $R=16\text{fm}$ und $R=400\text{fm}$ in einem linearen Korrelationsdiagramm aufgetragen. Die stärkste Energieänderung kann der $2p_{\frac{1}{2}}^{\uparrow}$ Zustand im Pb-Cm-System aufweisen. Er verliert zwischen den Abständen $R=16\text{fm}$ und $R=100\text{fm}$ 56,4 % seiner Bindungsenergie. In Tabelle 10 sind weitere Energieänderungen aufgezeigt. Der Energieverlust in Prozent ist auf $R=16\text{fm}$ bezogen. Wie wir aus der Tabelle entnehmen können, verliert der $1s^{\uparrow}$ Zustand innerhalb der ersten 84fm fast eine Elektronenmasse an seiner Bindungsenergie.

Tabelle 10: Energieänderung der Zustände zwischen den Abständen $R=16\text{fm}$ und $R=100\text{fm}$ des Pb-Cm-Systems.

Zustand	Punktkerne		ausgedehnte Kerne	
	keV	%		%
$1s^{\uparrow}$	625,99	49,19	498,99	43,6
$2s^{\uparrow}$	152,76	43,61	127,00	39,2
$2p_{\frac{1}{2}}^{\uparrow}$	509,08	62,83	388,40	56,4
$3s^{\uparrow}$	43,08	35,97	34,41	30,5
$3p_{\frac{1}{2}}^{\uparrow}$	34,23	21,79	49,14	33,5
$4s^{\uparrow}$	14,64	26,68	12,40	23,6
$4p_{\frac{1}{2}}^{\uparrow}$	11,06	16,79	15,43	24,8

Daß die Kernaussdehnung bei Zunahme der Kernladung des vereinigten Systems eine immer wichtigere Rolle spielt, können wir in Tabelle 11 am Beispiel des Quasimoleküls Pb-Cm erkennen. Die beiden am stärksten gebundenen Zustände ($1s_{\sigma}$, $2p_{\frac{1}{2}\sigma}$) sind für die Kernaussdehnung am sensitivsten. Wird die Kernaussdehnung berücksichtigt, dann verliert der $1s_{\sigma}$ Zustand ($R=16\text{fm}$) in Bezug auf seine Punktkernenergie 10% der Bindungsenergie, der $2p_{\frac{1}{2}\sigma}$ Zustand sogar 15 %.

Tabelle 11: Energiedifferenz des Quasimoleküls Pb-Cm mit Punktkern- und ausgedehnten Kernpotential bei $R=16\text{fm}$ und $R=100\text{fm}$

Zustand	$E(\text{keV}), R=16\text{fm}$	$E(\text{keV}), R=100\text{fm}$
$1s_{\sigma}$	128,79	1,79
$2s_{\sigma}$	26,28	0,52
$2p_{\frac{1}{2}\sigma}$	121,78	1,10
$3s_{\sigma}$	6,82	1,85
$3p_{\frac{1}{2}\sigma}$	10,32	0,21
$4s_{\sigma}$	2,30	0,06
$4p_{\frac{1}{2}\sigma}$	3,74	0,07

Betrachten wir zum Vergleich das Pb-Pb-System, so ist der Unterschied der Bindungsenergie bei $R=16\text{fm}$ zwischen

Punktkernlösung und ausgedehnter Kernlösung geringer. Er beträgt 6,9% für den $1s$ Zustand und 10,7% für den $2p_{\frac{1}{2}}$ Zustand.

Die drei nachfolgenden asymmetrischen Korrelationsdiagramme U-Cm, Pb-Cf, U-Cf zeigen von der Struktur her dasselbe Verhalten wie das Pb-Cm-System. Je nach der Kernladungszahl des vereinigten Systems sind die Energien der quasimolekularen Niveaus mehr oder weniger stark gebunden. Die verschiedenen Zustände der unterschiedlichen Korrelationsdiagramme haben zwar dieselben verbotenen Niveauekreuzungen, jedoch liegen diese bei verschobenen Zweizentrenabständen. In den Bildern 15a-d sind die Bindungsenergien des U-Cm-Systems in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand in analoger Weise zum Pb-Cm dargestellt. Die Bilder 16 a-c geben die Zustandsenergien des Pb-Cf Quasimoleküls wieder. Die Korrelationsdiagramme des bisher schwersten berechneten Zweizentrensystems U-Cf sind in den Bildern 17a-c abgebildet.

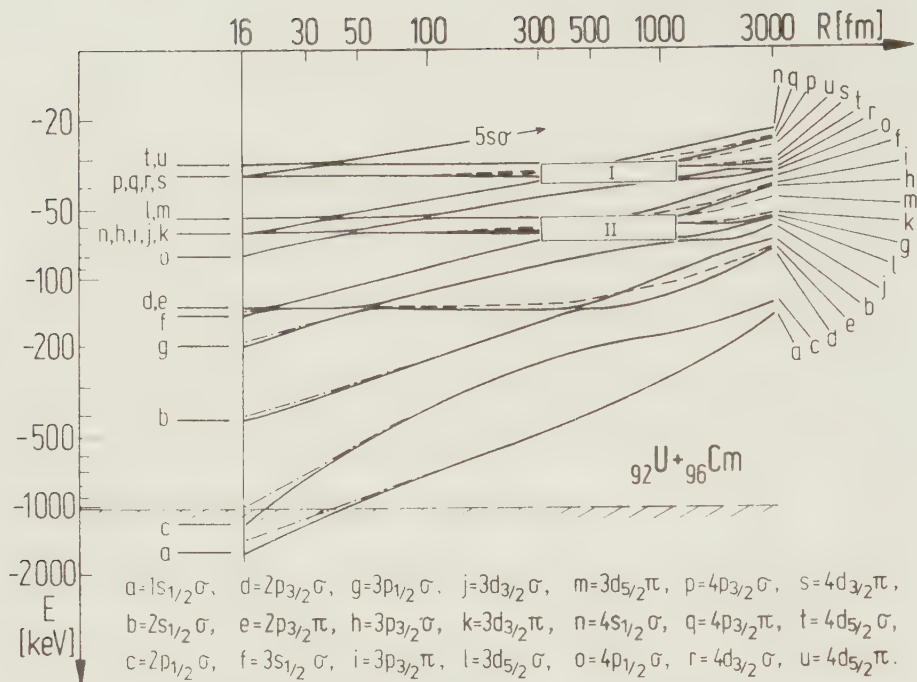


Bild 15a: Das relativistische Korrelationsdiagramm des superschweren Quasimoleküls U-Cm in einer doppellogarithmischen Darstellung. Aufgetragen sind in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand R die Bindungsenergien der 21 niedrigsten σ - (durchgezogene Linien) und π - (gestrichelte Linien) Zuständen. Die strichpunktierten Linien geben die entsprechenden Energien für ausgedehnte Kerne wieder. Der Verlauf des $5s\sigma$ Zustandes wurde bei kleinen Abständen ($R < 300\text{ fm}$) berechnet. Bei $R \sim 35\text{ fm}$ kommt es zwischen dem $5s\sigma$ - und $4d_{5/2}\sigma$ -Zustand zu

Bild 15a: einer verbotenen Kreuzung, die im Pb-Cm-Quasimolekül nicht erfolgt, da dort (Bild 14a) der $5s_{\sigma}$ - oberhalb des $4d_{\frac{5}{2}\sigma}$ -Zustandes liegt. Nicht nur der $1s_{\sigma}$ -Zustand taucht in das negative Kontinuum ein ($R_{\text{krit}}=43\text{fm}$), sondern auch der $2p_{\frac{1}{2}\sigma}$ -Zustand ($R_{\text{krit}}=16,8\text{fm}$). Die innerhalb der Rechtecke I und II der Übersicht halber ausgesparten Energieniveaus sind in den Bildern 15 b,c vergrößert in einem linearen Maßstab gezeichnet worden.

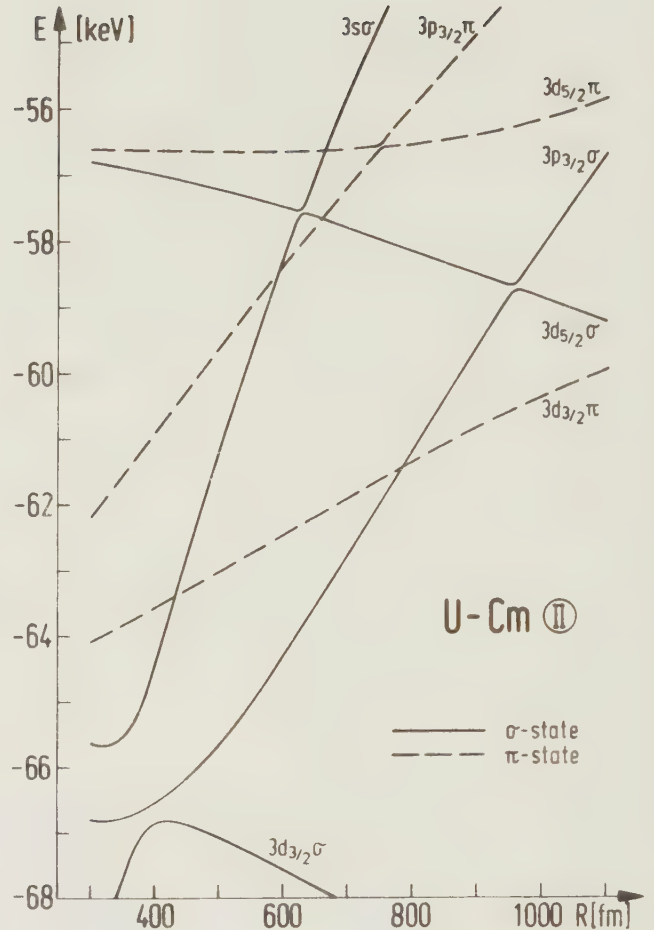
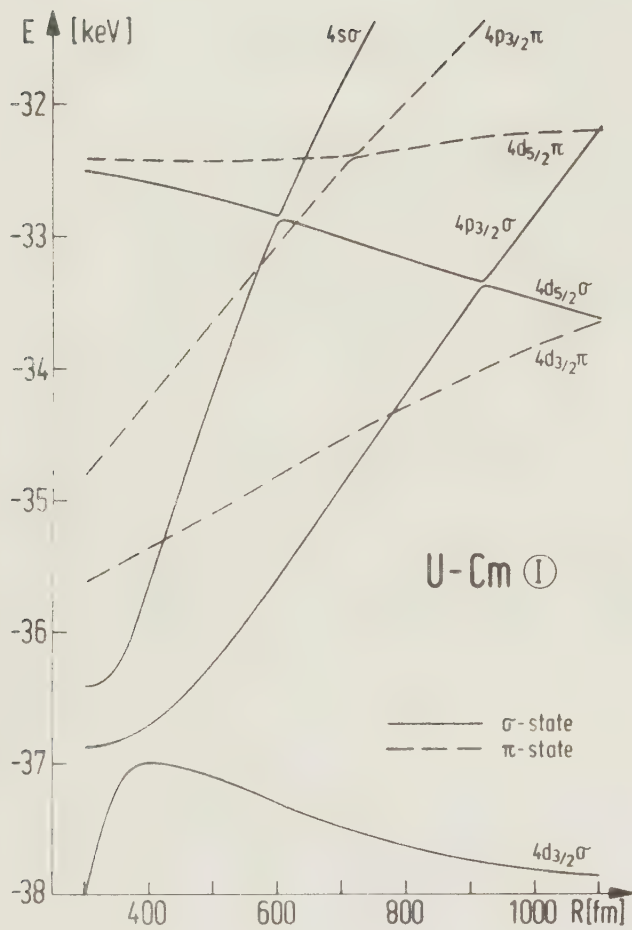


Bild 15 b,c: Die in den Rechtecken I und II des U-Cm-Korrelationsdiagrammes ausgesparten Bindungsenergien sind in einem linearen Maßstab in Abhängigkeit vom Abstand R aufgetragen. Analog zum Pb-Cm-System gibt es bei $R \sim 350$ fm zwischen den $3s\sigma$, $3p_{3/2}\sigma$ und $3d_{3/2}\sigma$ bzw. $4s\sigma$, $4p_{3/2}\sigma$ und $4d_{3/2}\sigma$ verbotene Kreuzungen, an denen jeweils 3 Zustände beteiligt sind.

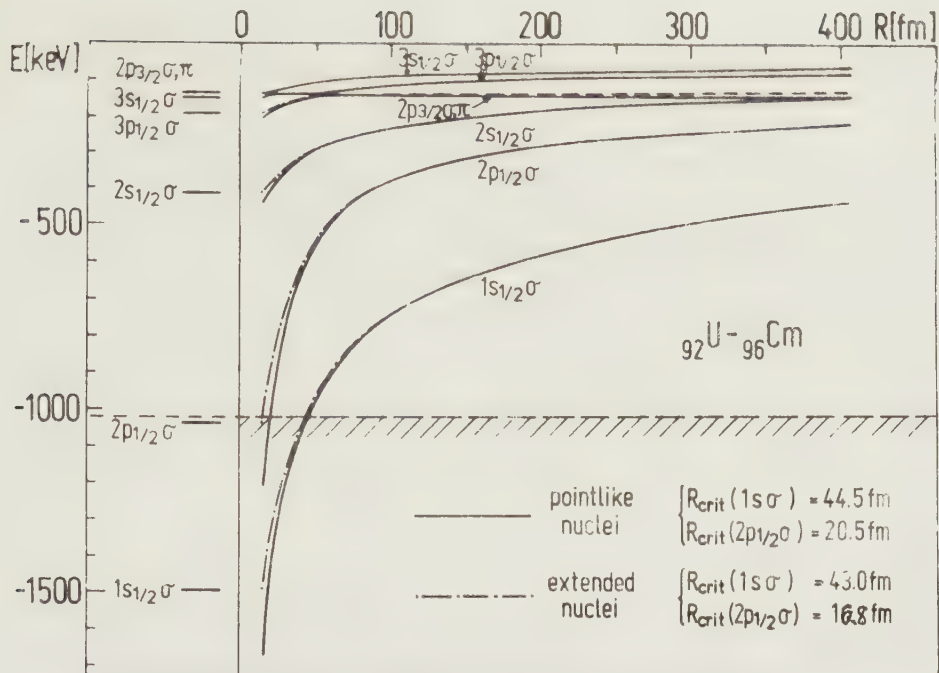


Bild 15 d: Das für kleine Abstände ($R < 400$ fm) aufgetragene lineare Korrelationsdiagramm des U-Cm-Quasimoleküls gibt den Verlauf der 7 niedrigsten σ - (durchgezogen) und π - (gestrichelt) Zustände in Abhängigkeit des Zweizentrenabstandes R wieder. Die strichpunktierten Linien geben die entsprechenden Energien für ausgedehnte Kerne wieder. In diesem Bild weisen wir besonders auf die sich stark ändernden Bindungsenergien in den ersten 100 fm hin.

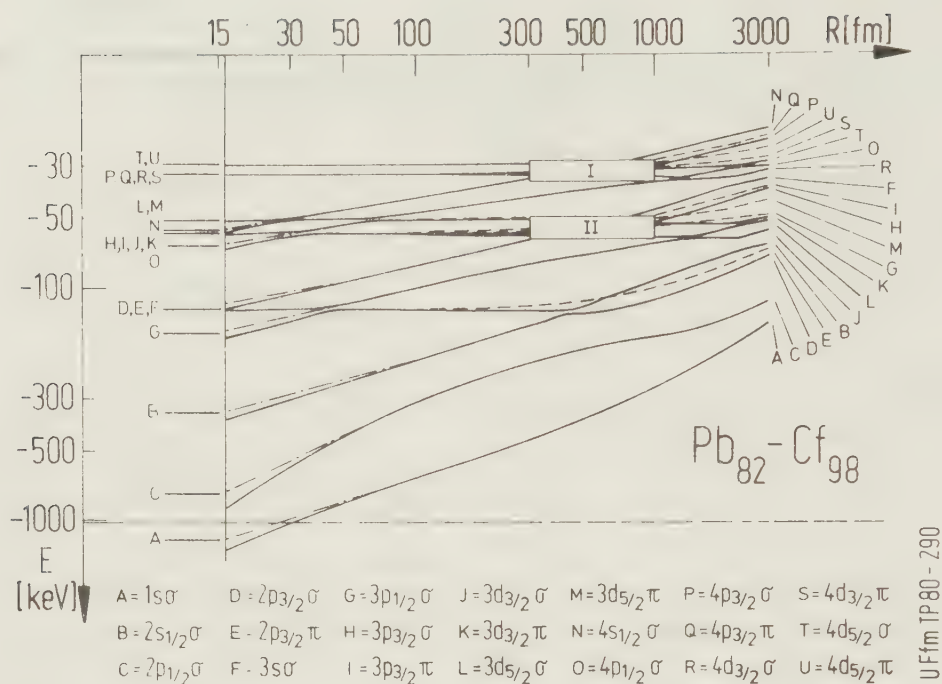


Bild 16 a: Das relativistische Korrelationsdiagramm des Pb-Cf-Quasimoleküls in einer doppellogarithmischen Darstellung. Aufgetragen sind in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand R die Bindungsenergien der 21 niedrigsten σ - (durchgezogene Linien) und π - (gestrichelte Linien) Zustände. Die strichpunktierten Linien geben die entsprechenden Energien für ausgedehnte Kerne wieder. Der $1s\sigma$ -Zustand taucht bei $R=26,4\text{ fm}$ in das negative Kontinuum ein. Die innerhalb der Rechtecke I und II fehlenden Energieniveaus sind in den Bildern 16 b,c in einem linearen Maßstab vergrößert gezeichnet worden.

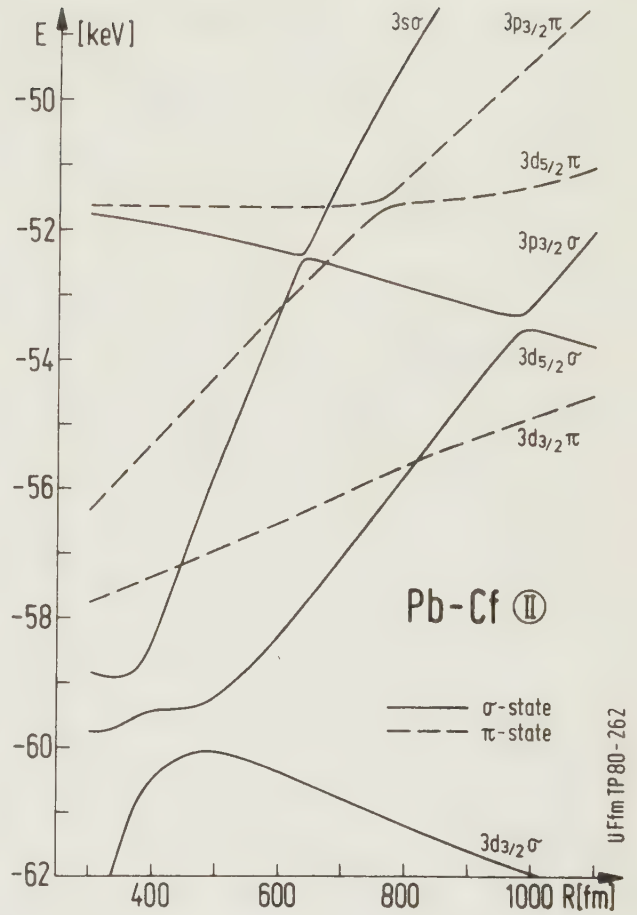
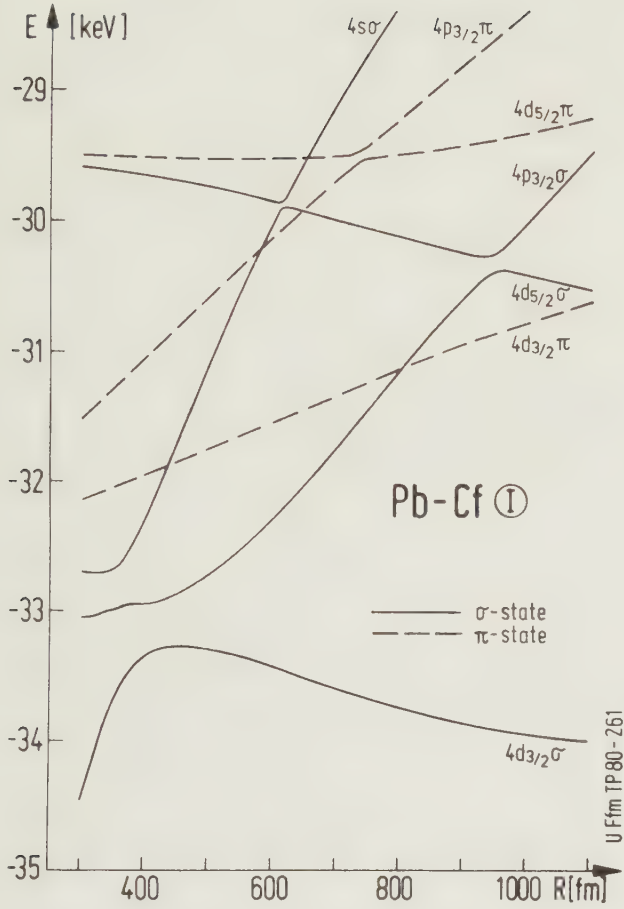


Bild 16 b,c: Die innerhalb der Rechtecke I und II des Korrelationsdiagrammes des Pb-Cf (Bild 16a) fehlenden Energieniveaus sind in einem linearen Maßstab aufgezeichnet worden.

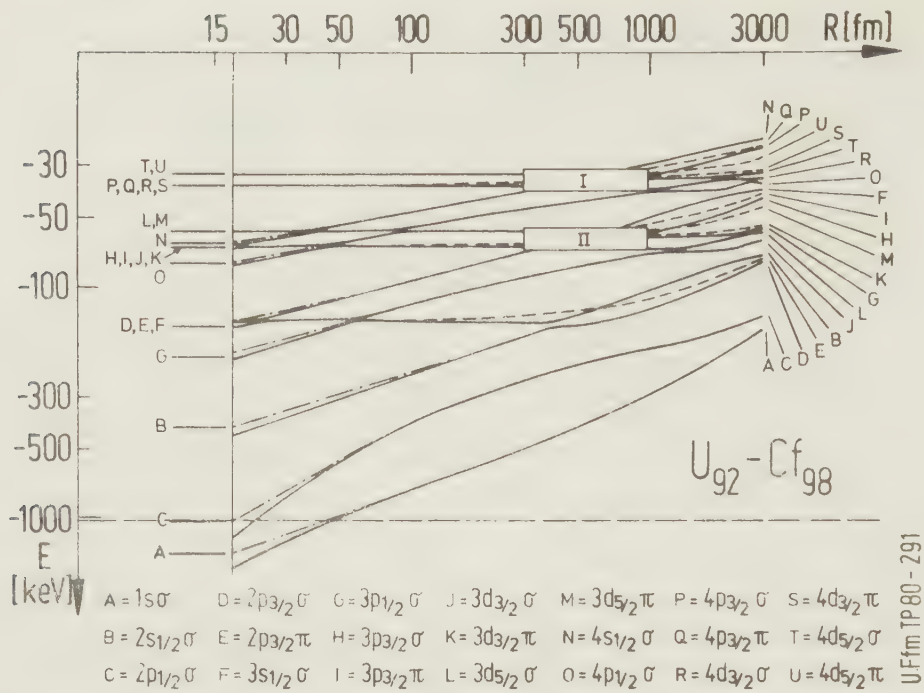


Bild 17a: Das relativistische Korrelationsdiagramm des superschweren Quasimoleküls U-Cf in einer doppellogarithmischen Darstellung. Aufgetragen sind in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand R die Bindungsenergien der 21 niedrigsten σ - (durchgezogene Linien) und π - (gestrichelte Linien) Zuständen. Die strichpunktierten Linien geben die entsprechenden Energien für ausgedehnte Kerne wieder. Nicht nur der $1s\sigma$ -Zustand taucht in das negative Kontinuum ein ($R_{\text{krit}} = 47,4\text{fm}$), sondern auch der $2p\frac{1}{2}\sigma$ -Zustand ($R_{\text{krit}} = 18,3\text{fm}$). Die innerhalb der Rechtecke I und II der Übersicht halber ausgesparten Energieniveaus sind in den Bildern 17 b,c in einem linearen Maßstab vergrößert gezeichnet worden.

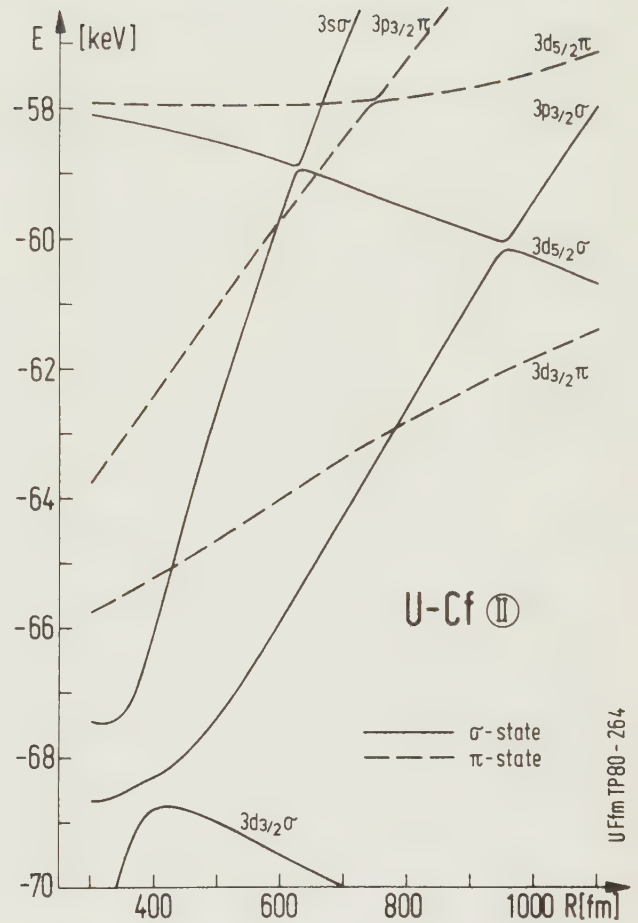
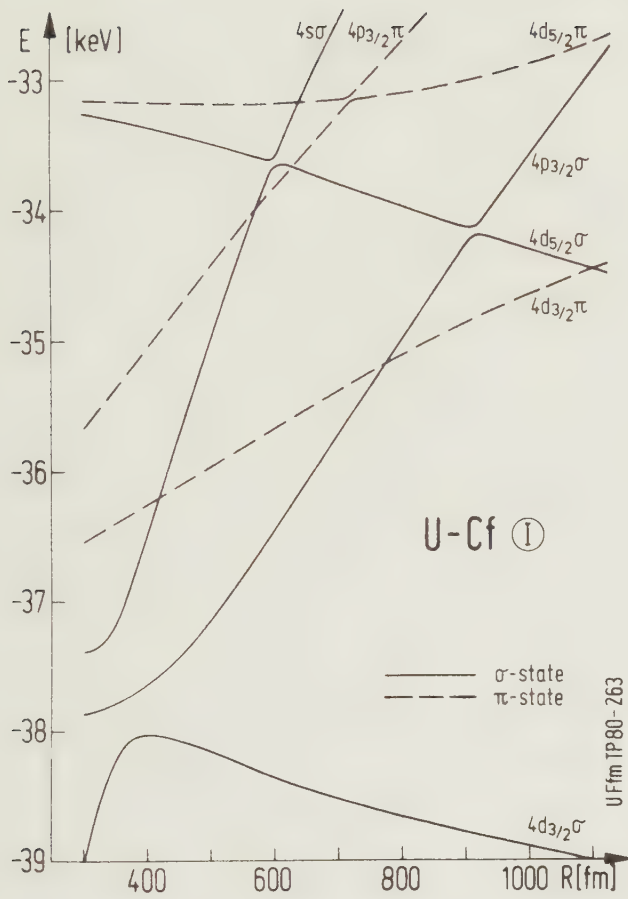


Bild 17 b,c: Die Ausschnitte I und II aus dem Korrelationsdiagramm 17a. Die durch Rechtecke ausgesparten Energieniveaus sind in einem linearen Maßstab aufgezeichnet worden.

IV.3 Der Eintauchpunkt überkritischer Quasimoleküle

Wir haben im vorigen Abschnitt darauf hingewiesen, daß eine Erhöhung der Gesamtladung $Z_1 + Z_2 = Z_{u.a.}$ eines Quasimoleküls die Elektronenniveaus energetisch absenkt. Bei einer Gesamtladung von $Z_{krit} \sim 173^8$ entspricht der Bindungsenergie des $1s_{\sigma}$ -Zustandes der zweifachen Elektronenmasse. Der $2p_{\frac{1}{2}\sigma}$ Zustand erreicht diese Energie bei $Z_{krit} \sim 185$ (Abschirmungseffekte sind in diesen Werten schon berücksichtigt⁸). Ist die Gesamtladung eines Quasimoleküls größer als Z_{krit} , dann erreicht der $1s_{\sigma}$ ($2p_{\frac{1}{2}\sigma}$) Zustand die Grenze des negativen Kontinuums bei $-2m_e c^2$ noch bevor die beiden Kerne sich berühren, bzw. miteinander fusionieren. Verkleinert sich der Zweizentrenabstand weiterhin, so ist die Bindungsenergie größer als $2m_e c^2$. Der Zustand taucht bei dem kritischen Zweizentrenabstand R_{krit} in das negative Kontinuum ein. Wird dieser kritische Abstand überschritten, so ändert sich das Spektrum des Zweizentren-diracoperators. Ein diskreter Zustand "taucht" in das negative Kontinuum ein und vermischt sich mit ihm. Wir beobachten eine Resonanz. Ein schematisches Bild einer überkritischen $1s_{\sigma}$ -Wellenfunktion wird in Bild 18 gegeben. Der Verlauf der Wellenfunktion ist in Abhängigkeit zur radialen Koordinate r dargestellt.

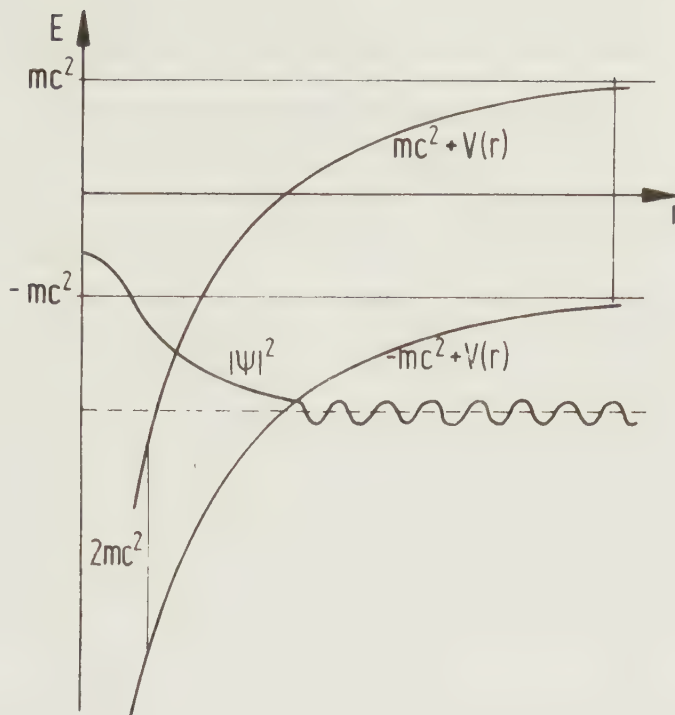


Bild 18: Schematisches Bild einer überkritischen 1s-Wellenfunktion.¹⁵ Im Bereich $V - mc^2 < E_{1s} < V + mc^2$ wird die Energielücke zwischen Teilchen- und Antiteilchen-Kontinuum durchtunnelt.

Im Innenbereich des Potentials $V(r) + m_e c^2$ ähnelt die Wellenfunktion einem $1s\sigma$ -Zustand im diskreten Spektrum des Zweizentren Diracoperators. Außerhalb dieser Barriere oszilliert die Wellenfunktion. Dieses Verhalten der Wellenfunktion wird als Durchtunnelungseffekt angesehen. Hierbei wird ihr "Elektronenteil" bzw. "Positronenteil" durch den klassischen

gap der Diracgleichung zwischen $V(r) - m_e c^2$ und $V(r) + m_e c^2$ getrennt. Taucht ein Zustand in das negative Kontinuum ein, so kann es zur spontanen Erzeugung von Positronen⁵⁻⁷ durch das starke elektrische Feld kommen. Hierbei handelt es sich um eine Elektron-Positron-Paarerzeugung, da die Bindungsenergie größer als $2m_e c^2$ ist. Rafelski, Müller und Greiner⁵ und Fulcher und Klein⁷¹, Reinhardt (Dissertation)¹⁵ haben diese Effekte theoretisch untersucht. Der normale Grundzustand des Quasimoleküls wird durch die Positronenemission instabil. Es kommt zu einem spontanen Zerfall des Vakuums in einen neuen, geladenen Vakuumzustand.

Wir haben für verschiedene superschwere Quasimoleküle die Eintauchpunkte sowohl für Punktkerne als auch für ausgedehnte Kerne bestimmt. In Tabelle 12 sind für die verschiedenen Systeme die kritischen Abstände der $1s$ und $2p_{1/2}$ Zustände angegeben. Für den Kernradius wurde die Beziehung $r_0 = 1.2 \cdot A^{1/3}$ fm verwendet.

V.I.Lisni, M.S.Marinov und V.S.Popov⁷² haben mit Hilfe einer Variationsmethode für symmetrische Systeme mit der Gesamtladung $170 \leq Z_{u.a.} \leq 200$ ebenfalls den kritischen Abstand berechnet. Bei Punktkernen liegen ihre kritischen Zweizentrenabstände etwa 5% über unseren Ergebnissen, bei ausgedehntem Kernpotential um 5% niedriger.

Tabelle 12: Kritische Abstände für die Niveaus $1s\frac{1}{2}$ und $2p\frac{1}{2}$ im Feld von zwei Punktkernen (R_{krit}^P) bzw. ausgedehnten Kernen (R_{krit}^A).

System	Z _{u.a.}	$R_{krit}^P(1s\frac{1}{2})$ (fm)	$R_{krit}^A(1s\frac{1}{2})$ (fm)	$R_{krit}^P(2p\frac{1}{2})$ (fm)	$R_{krit}^A(2p\frac{1}{2})$ (fm)
178	Pb-Cm	26,5	23,2	-	-
180	Pb-Cf	30,0	26,4	-	-
184	U-U	37,2	34,5	16,8	-
188	U-Cm	44,5	43,0	20,5	16,8
190	U-Cf	48,7	47,4	22,1	18,3

IV.4 Die Monopolnäherung

Das Zweizentrenpotential ist bei kleinen Abständen ($R \sim 20 \text{ fm}$) kugelsymmetrisch. Der Monopolterm ($l=0$) des Zweizentrenpotentials ist dominant. Zu großen Abständen R hin nimmt der relative Anteil der höheren Multipole zum Gesamtpotential zu. Zur Lösung der Zweizentren-diracgleichung muß dieser Effekt durch die Erhöhung der Anzahl der Entwicklungsterme berücksichtigt werden. Verwenden wir bei der Lösung der Zweizentren-diracgleichung in der Multipolentwicklung des Zweizentrenpotentials nur den Term mit $l=0$, so nennen wir diese Näherung Monopolapproximation. In dieser Approximation simuliert eine geladene Kugelschale mit dem Radius $R_n = \frac{1}{2}R$ das Coulombpotential zweier Kerne, die durch den Abstand R voneinander getrennt sind. Wir finden für die Bindungsenergie der $s_{\frac{1}{2}}$, $p_{\frac{1}{2}}$ -Zustände in symmetrischen und asymmetrischen Quasimolekülen eine gute Übereinstimmung von ca. 5% zwischen den Monopolrechnungen und den exakten Zweizentrenrechnungen bei einem Abstand bis $R \sim 400 \text{ fm}$ ⁴⁰.

In Tabelle 13 vergleichen wir beide Lösungsarten am Beispiel des Er-Er und Xe-Pb-Systems. In Bild 19 sind für das Pb-Pb-System die Energien der $1s$, $2s$, $3s$ und $2p_{\frac{1}{2}}$ Zuständen bis zu einem Abstand von 1000 fm in der Monopolapproximation und exakter Zweizentrenrechnungen aufgezeichnet.

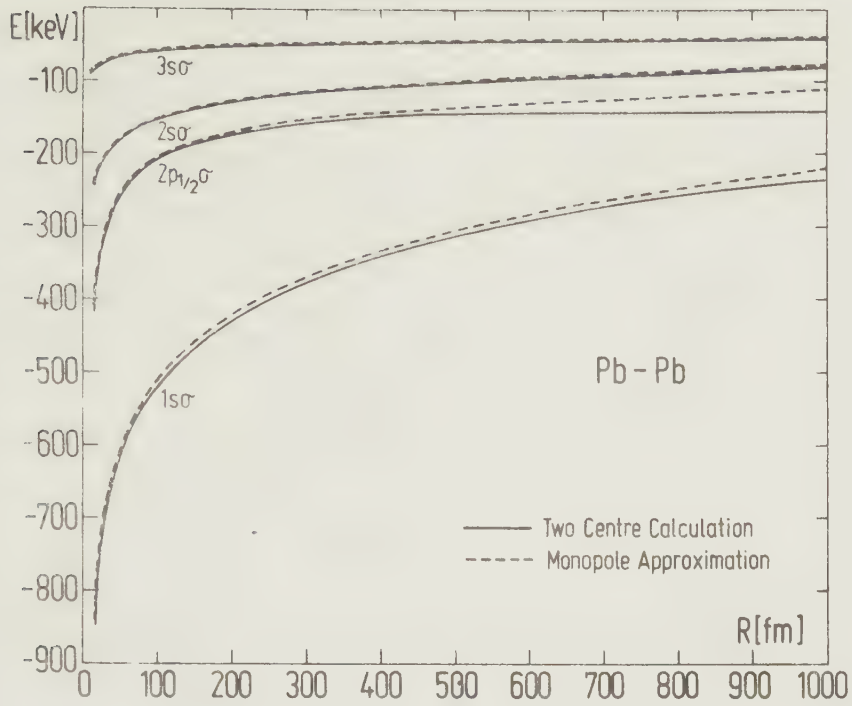


Bild 19: Vergleich der Bindungsenergien des $1s\sigma$, $2p_{1/2}\sigma$, $2s\sigma$ und $3s\sigma$ im Pb-Pb-Quasimolekül, berechnet in der Monopolapproximation (gestrichelte Linien) und den exakten Zweizentrenrechnungen (durchgezogene Linien) als Funktion des Abstandes R.

Tabelle 13: Vergleich der in Monopolapproximation berechneten $1s$ Bindungsenergie an verschiedenen Zweizentrenabständen R mit den exakten Zweizentrenenergieergebnissen des symmetrischen Er-Er ($Z=68$) und asymmetrischen Xe-Pb-Systems⁴⁰

Z_1	Z_2	R (fm)	E_{1s}^{MP} (keV)	E_{1s}^{TC} (keV)
68	68	100	-319.028	-321.842
68	68	500	-218.778	-225.387
68	68	1000	-164.040	-173.599
54	82	100	-320.387	-322.748
54	82	500	-221.310	-226.795
54	82	1000	-167.020	-174.770

Vergleichen wir jedoch $p_{\frac{3}{2}}$, $d_{\frac{3}{2}}$ und $d_{\frac{5}{2}}$ Zustände, so stellen wir größere Abweichungen zwischen der Monopolrechnung und den Multipolrechnungen bei asymmetrischen Quasimolekülen fest. Hier liefert bei kleinen Abständen R der Dipolterm des asymmetrischen Zweizentrenpotentials einen wichtigen Beitrag zu den Energien und Wellenfunktionen. Dieser Dipolterm bewirkt, daß die Wellenfunktion Komponenten mit verschiedener Parität besitzt. Verantwortlich hierfür sind die beiden Summationsterme $\sum_{\vec{k}, l} f_{\mu\vec{k}}(r) V_l(r, R) A_{(\vec{k}, l, \vec{k})}^{\mu}$ bzw. $\sum_{\vec{k}, l} g_{\mu\vec{k}}(r) V_l(r, R) A_{(-\vec{k}, l, -\vec{k})}^{\mu}$ in den gekoppelten Differentialgleichungen (II.8). Die höheren Multipolterme $l \geq 2$ sind durch das fast kugelsymmetrische Zweizentrenpotential bei kleinen Abständen $R < 400$ fm ohne Einfluß.

V. Dichteverteilung der Elektronen in Quasimolekülen

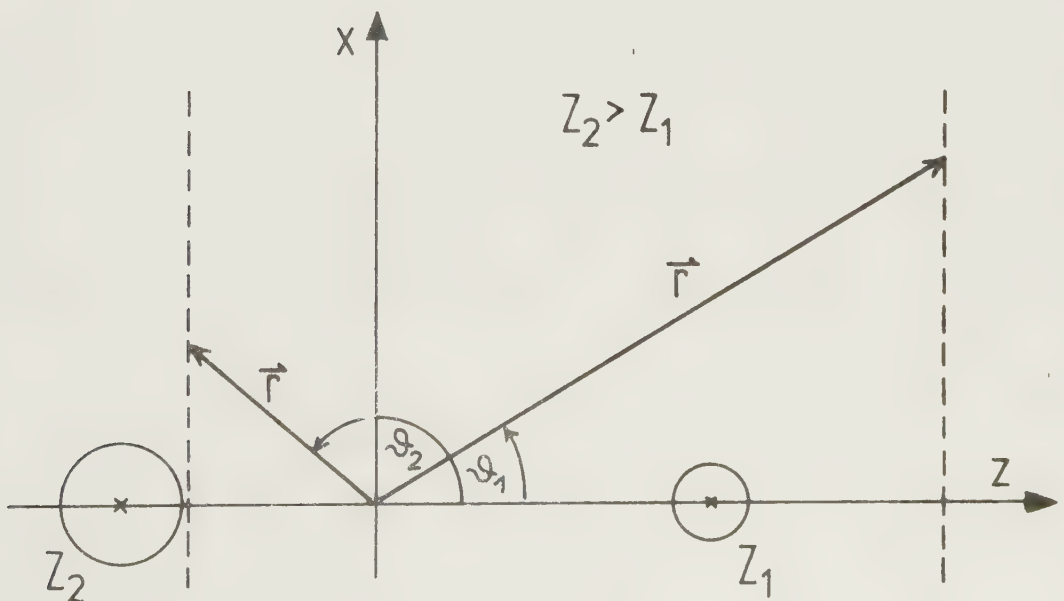
V.1 Der Formalismus

Bei der Untersuchung der Translationseffekte in super-schweren Quasimolekülen stellt sich die Frage, bei welchem Abstand die Elektronenzustände ihre molekulare Struktur verlieren. Zum anderen sind wir auch an einer graphischen Darstellung der Kugelsymmetrie bei kleinen Abständen interessiert. Integrieren wir senkrecht zur internuklearen Achse eines Quasimoleküles über die Elektronendichte, so erhalten wir ein Bild der Elektronenverteilung

$$I(z) = \int_0^{\infty} g dg \int_0^{2\pi} d\varphi \psi^*(g, \varphi, z) \psi(g, \varphi, z) . \quad (V.1)$$

g, φ und z sind die Zylinderkoordinaten. Die z -Achse entspricht der Verbindungsachse der beiden Kerne (Bild 20).

Bild 20:



Da wir die Wellenfunktionen der Quasimoleküle und damit die Elektronendichte nur in Kugelkoordinaten kennen, führen wir eine Koordinatentransformation durch. Dem zylindrischen Flächenelement $\varrho d\varrho d\varphi$ entspricht das Kugelflächenelement $r dr d\varphi$, Substituieren wir $r^2 = \varrho^2 + z^2$, so gilt $\varrho d\varrho = r dr$ und damit

$$I(z) = \int_{r_{\min}}^{\infty} r dr \int_0^{2\pi} d\varphi \psi^*(r, \vartheta(r), \varphi) \psi(r, \vartheta(r), \varphi) . \quad (V.2)$$

Für einen bestimmten z -Wert (in Bild 20 gestrichelt gezeichnet) beginnt die radiale Integration bei $r_{\min} = z$. Die Abhängigkeit des Winkels ϑ von der radialen Koordinate r können wir aus dem Bild 20 ablesen. Wir finden für $z > 0$, $z < 0$

$$\cos \vartheta = \frac{z}{r} . \quad (V.3)$$

Ausgehend von der Zweizentrenwellenfunktion (II.3)

$$\psi^\mu(r) = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} f_{\mathbf{k}}^\mu(r) \chi^\mu \\ -i g_{\mathbf{k}}^\mu(r) \chi^\mu \end{pmatrix}$$

erhalten wir für die Elektronendichte folgenden Ausdruck:

$$\begin{aligned} \varrho(r, \vartheta, \varphi) &= \psi^*(r, \vartheta, \varphi) \psi(r, \vartheta, \varphi) = \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \bar{\mathbf{k}}} \sum_{m=\pm\frac{1}{2}} \left(f_{\mathbf{k}}^\mu(r) f_{\bar{\mathbf{k}}}^\mu(r) C(\mathbf{k}, m) C(\bar{\mathbf{k}}, m)^* (-1)^{\mu-m} Y_{1\mathbf{k}}^{-\mu+m}(\vartheta, \varphi) Y_{1\bar{\mathbf{k}}}^{\mu-m}(\vartheta, \varphi) \right. \\ &\quad \left. + g_{\mathbf{k}}^\mu(r) g_{\bar{\mathbf{k}}}^\mu(r) C(-\mathbf{k}, m) C(-\bar{\mathbf{k}}, m) (-1)^{\mu-m} * Y_{1-\mathbf{k}}^{-\mu+m}(\vartheta, \varphi) Y_{1-\bar{\mathbf{k}}}^{\mu-m}(\vartheta, \varphi) \right) . \end{aligned} \quad (V.4)$$

Dabei haben wir als Abkürzung der Clebsh-Gordan-Koeffizienten

$$C(\kappa, m) = C(1_{\kappa} \frac{1}{2} j_{\kappa}, \mu-m, m) \quad (V.5)$$

$$C(\bar{\kappa}, m) = C(1_{\bar{\kappa}} \frac{1}{2} j_{\bar{\kappa}}, \mu-m, m)$$

verwendet. Unter Berücksichtigung der Beziehung zwischen den Kugelfunktionen und den zugeordneten Legendrefunktionen⁷³

$$Y_n^q(\vartheta, \varphi) = (-1)^q \sqrt{\frac{(2n+1)(n-q)!}{4\pi(n+q)!}} P_n^q(\cos\vartheta) e^{iq\varphi} \quad (V.6)$$

können wir zeigen, daß die Dichte ϱ unabhängig vom Winkel ist. Einsetzen liefert

$$\begin{aligned} Y_{1_{\kappa}}^{-\mu+m}(\vartheta, \varphi) Y_{1_{\bar{\kappa}}}^{\mu-m}(\vartheta, \varphi) &= (-1)^{-\mu+m} (-1)^{\mu-m} \sqrt{\frac{(21_{\kappa}+1)(1_{\kappa}+\mu-m)!}{4\pi(1_{\kappa}-\mu+m)!}} * \\ &* \sqrt{\frac{(21_{\bar{\kappa}}+1)(1_{\bar{\kappa}}-\mu+m)!}{4\pi(1_{\bar{\kappa}}+\mu-m)!}} * P_{1_{\kappa}}^{-\mu+m}(\cos\vartheta) P_{1_{\bar{\kappa}}}^{\mu-m}(\cos\vartheta) e^{i\varphi(-\mu+m)} e^{i\varphi(\mu-m)} \\ &= \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{(21_{\kappa}+1)(21_{\bar{\kappa}}+1)(1_{\kappa}+\mu-m)!(1_{\bar{\kappa}}-\mu+m)!}{(1_{\kappa}-\mu+m)!(1_{\bar{\kappa}}+\mu-m)!}} P_{1_{\kappa}}^{-\mu+m}(\cos\vartheta) P_{1_{\bar{\kappa}}}^{\mu-m}(\cos\vartheta) \\ &= \frac{1}{4\pi} W(\kappa, \bar{\kappa}, m) P_{1_{\kappa}}^{-\mu+m}(\cos\vartheta) P_{1_{\bar{\kappa}}}^{\mu-m}(\cos\vartheta) \end{aligned} \quad (V.7)$$

mit der Abkürzung

$$W(\kappa, \bar{\kappa}, m) = \sqrt{\frac{(21_{\kappa}+1)(21_{\bar{\kappa}}+1)(1_{\kappa}+\mu-m)!(1_{\bar{\kappa}}-\mu+m)!}{(1_{\kappa}-\mu+m)!(1_{\bar{\kappa}}+\mu-m)!}} \quad (V.8)$$

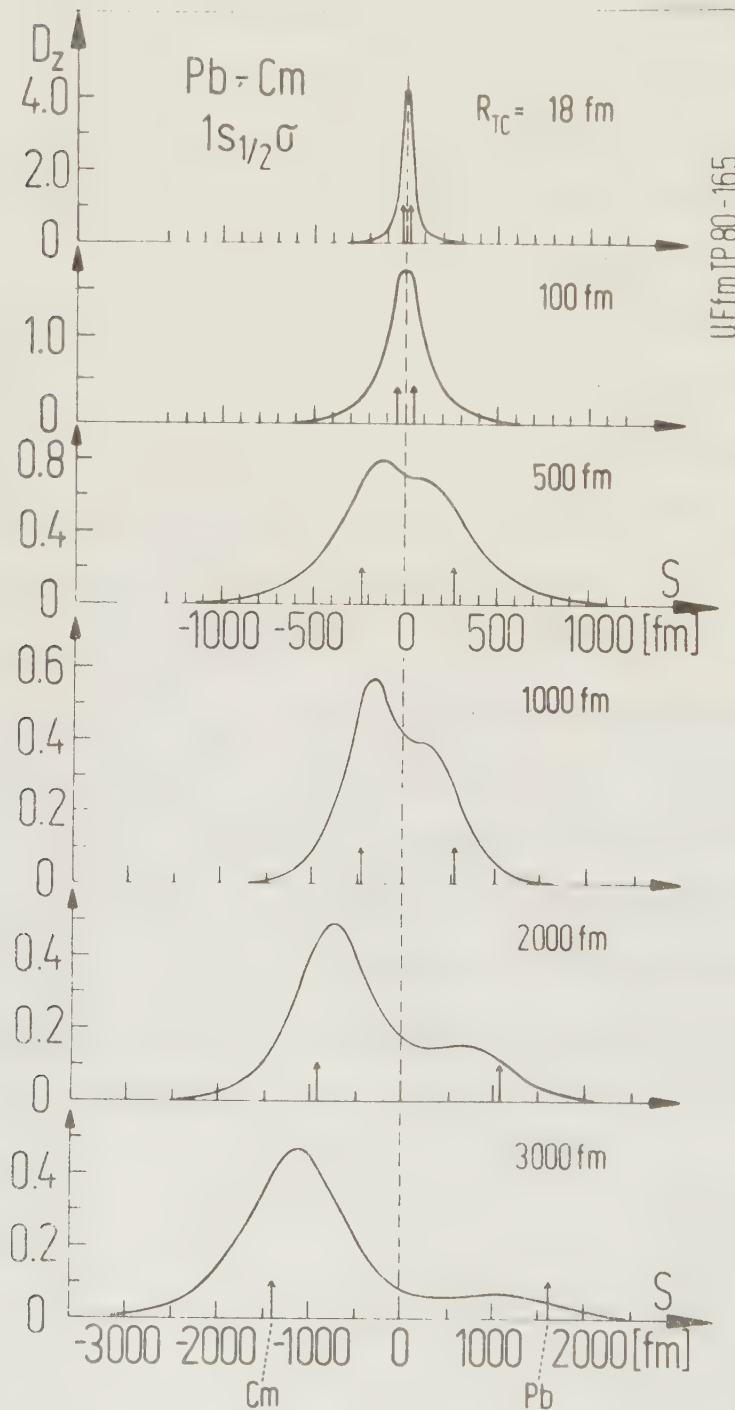
V.2 Asymmetrische Zweizentrensysteme

In den Bildern 21 bis 31 sind für die beiden Systeme Pb-Cm und Pb-Pb die Elektronendichte (Ordinate) entlang der internuklearen Achse (Abszisse) aufgetragen. Betrachten wir zuerst Bild 21. Für den $1s_{\sigma}$ -Zustand des Pb-Cm-Systems ist für sechs verschiedene Zweizentrenabstände R_{TC} die Elektronendichte aufgezeichnet. Der Koordinatenursprung ist der Massenschwerpunkt, der auf der Verbindungsachse der beiden Kerne liegt. Die Pfeile symbolisieren den Standort der beiden Kerne. Auf der negativen Abszissenachse befindet sich der Cm-Kern, auf der positiven Abszissenachse der Pb-Kern. Der Abstand zwischen den beiden Pfeilen entspricht dem Zweizentrenabstand R_{TC} des Quasimoleküls. In den Bildern 21-25 sind zwei verschiedene Abszisseneinteilungen verwendet worden, damit bei kleinen Abständen die Struktur der Elektronendichte deutlicher dargestellt werden kann. Die Dichteverteilung des $1s_{\sigma}$ Zustandes bei $R_{TC}=18\text{fm}$ und $R_{TC}=100\text{fm}$ ist um den Ladungsschwerpunkt symmetrisch, d.h., der quasimolekulare Zustand hat Kugelsymmetrie. Alle gebundenen Zustände zeigen bei kleinen Abständen dieses Verhalten. Durch diese symmetrische Dichteverteilung der Elektronen ist es gerechtfertigt, die Zweizentrenwellenfunktionen nach Multipolen zu entwickeln.

Bei einem Abstand von $R_{TC}=500\text{fm}$ beginnt sich die Dichteverteilung des $1s$ Elektrons in zwei Maxima aufzuspalten.

Der molekulare $1s$ Zustand beginnt in den atomaren $1s$ - Zustand des Cm-Atoms überzugehen. Betrachten wir den klassischen Bohrschen Radius beider Atome, so wird dies verständlich. Für Cm ist $r_B^{1s} \sim 562\text{fm}$, für Pb ist $r_B^{1s} \sim 658\text{fm}$. Der Übergang des $1s$ Zustandes vom molekularen in einen atomaren Zustand wird um so deutlicher, je größer R_{TC} wird. Ist $R_{TC}=3000\text{fm}$, dann ist der $1s$ Zustand nur noch um das Cm-Ion lokalisiert. Die Verschiebung des Maximums in der Dichteverteilung vom Cm-Kern weg ist auf den attraktiven Einfluß des Pb-Kerns zurückzuführen. Im letzten Kapitel hatten wir festgestellt, daß bis zu einem Abstand $R=400\text{fm}$ die Monopolnäherung mit den exakten Zweizentrenrechnungen für $s_{\frac{1}{2}}$ und $p_{\frac{1}{2}}$ Zustände gut übereinstimmen. Das Wandern des Maximums der Elektronendichte vom Ladungsschwerpunkt zu einem der beiden Kernzentren zeigt, daß der Monopolterm bei der Entwicklung des Zweizentrenpotentials nicht mehr ausreicht. Je größer der Zweizentrenabstand R_{TC} wird, je weiter das Maximum der Dichteverteilung vom Ladungsschwerpunkt entfernt ist, um so geringer ist das Zweizentrenpotential kugelsymmetrisch, desto mehr Multipole müssen bei der Entwicklung des Zweizentrenpotentials und damit der Wellenfunktionen mitgenommen werden. Im Pb-Cm-Quasimolekül ist der $2p_{\frac{1}{2}}$ Zustand am zweitstärksten gebunden.

Bild 21: Für den $1s$ Zustand des Pb-Cm-Quasimoleküls sind für sechs Zweizentrenabstände R_{TC} die Elektronendichte (Ordinate) entlang der internuklearen Achse (Abszisse) aufgetragen. Der Koordinatenursprung ist der Massenschwerpunkt, der auf der Verbindungsachse der beiden Kerne liegt. Die Pfeile symbolisieren den Standort der beiden Kerne.



In Bild 22 sind für verschiedene Abstände R_{TC} die Dichteverteilungen des $2p_{\frac{1}{2}}^1$ Elektrons abgebildet. Im Gegensatz zur $1s^1$ Dichteverteilung fällt sofort die Einschnürung bei $R_{TC}=100\text{fm}$ am Ladungsschwerpunkt auf.

Von der allgemeinen Theorie asymmetrischer Korrelationsdiagramme wissen wir, daß der $2p_{\frac{1}{2}}^1$ Zustand in den $1s^1$ Zustand des leichteren Partners übergeht. In der Dichteverteilung des $2p_{\frac{1}{2}}^1$ -Elektrons verlagert sich das Maximum von dem Ladungsschwerpunkt ($R_{TC}=18\text{fm}$) zum Pb-Kern bei $R_{TC}=3000\text{fm}$. Der attraktive Einfluß des Curium-Kerns bewirkt eine Verschiebung des Maximums vom Blei-Kern weg. Bei $R_{TC}=3000\text{fm}$ ist der molekulare $2p_{\frac{1}{2}}^1$ -Zustand in den atomaren $1s^1$ Zustand des Blei-Kerns übergegangen.

In Bild 23 ist die Dichteverteilung des $2s^1$ -Elektrons bei verschiedenen Abständen aufgezeichnet. Das $2s^1$ Elektron unterscheidet sich vom $1s^1$ Elektron durch einen Knoten in der Wellenfunktion. In der Dichteverteilung tauchen deshalb zwei Minima auf, die bei $R_{TC}=3000\text{fm}$ besonders ausgeprägt sind. Das größte Maximum ist weiterhin um den Ladungsschwerpunkt lokalisiert, d.h., bei $R_{TC}=3000\text{fm}$ sitzt das $2s_{\frac{1}{2}}^1$ -Elektron noch in einem molekularen Zustand. Im Gegensatz zu den $s_{\frac{1}{2}}^1$ und $p_{\frac{1}{2}}^1$ Zuständen ist bei der Elektronendichteverteilung des $2p_{\frac{3}{2}}^3$ Zustandes bei $R_{TC}=18\text{fm}$

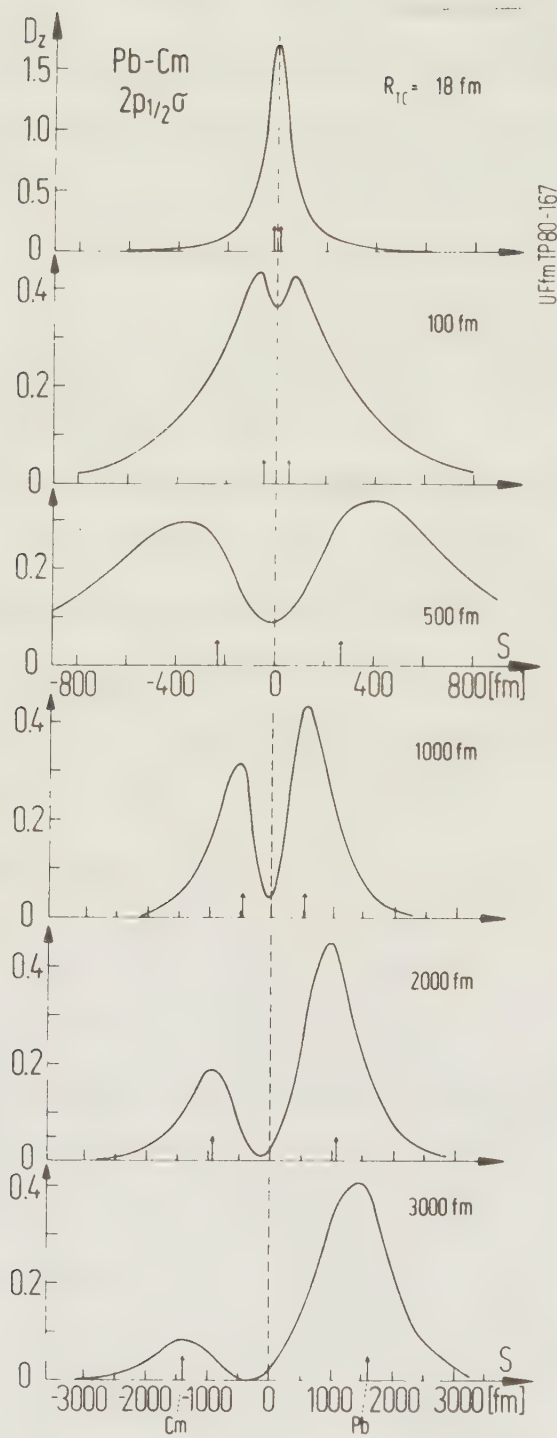


Bild 22: Figurenbeschreibung wie in Bild 21, jedoch für den $2p_{1/2}\sigma$ Zustand.

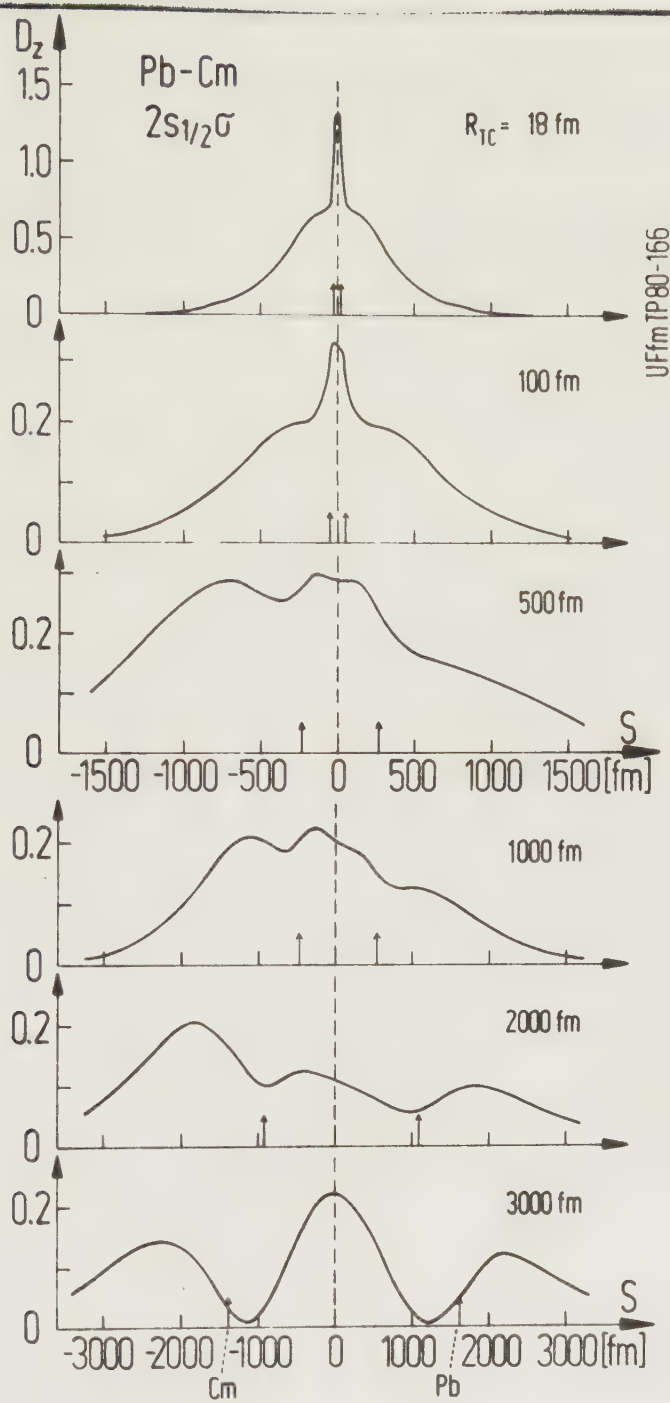


Bild 23: Figurenbeschreibung wie in Bild 21, jedoch für den $2s_{1/2}$ Zustand.

Setzen wir die Gleichung (7) in (4) ein, so finden wir

$$g(r) = \sum_{\mathbf{k}, \bar{\mathbf{k}}, m} \left(\frac{(-1)^{\mu-m}}{4\pi} C(\mathbf{k}, m) C(\bar{\mathbf{k}}, m) W(\mathbf{k}, \bar{\mathbf{k}}, m) \right. \quad (\text{V.9})$$

$$\cdot P_{1_{\mathbf{k}}}^{-\mu+m}(\cos \vartheta(r)) P_{1_{\bar{\mathbf{k}}}}^{\mu-m}(\cos \vartheta(r)) f_{\mathbf{k}}^{\mu}(r) f_{\bar{\mathbf{k}}}^{\mu}(r)$$

$$+ \frac{(-1)^{\mu-m}}{4\pi} C(-\mathbf{k}, m) C(-\bar{\mathbf{k}}, m) W(-\mathbf{k}, -\bar{\mathbf{k}}, m) \cdot$$

$$\cdot P_{1_{-\mathbf{k}}}^{-\mu+m}(\cos \vartheta(r)) P_{1_{-\bar{\mathbf{k}}}}^{\mu-m}(\cos \vartheta(r)) g_{\mathbf{k}}^{\mu}(r) g_{\bar{\mathbf{k}}}^{\mu}(r) \Big) .$$

Bei der Berechnung des Integrals (2) liefert die Integration über ϑ 2π . Wir haben nur noch die Integration über r durchzuführen. Berücksichtigen wir (3), so erhalten wir

$$\int_z^{\infty} r dr \int_0^{2\pi} d\vartheta g(r) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \bar{\mathbf{k}}, m} \left((-1)^{\mu-m} C(\mathbf{k}, m) C(\bar{\mathbf{k}}, m) W(\mathbf{k}, \bar{\mathbf{k}}, m) \right. \quad (\text{V.10})$$

$$\cdot \int_z^{\infty} r dr P_{1_{\mathbf{k}}}^{-\mu+m}\left(\frac{z}{r}\right) P_{1_{\bar{\mathbf{k}}}}^{\mu-m}\left(\frac{z}{r}\right) f_{\mathbf{k}}^{\mu}(r) f_{\bar{\mathbf{k}}}^{\mu}(r)$$

$$+ (-1)^{\mu-m} C(-\mathbf{k}, m) C(-\bar{\mathbf{k}}, m) W(-\mathbf{k}, -\bar{\mathbf{k}}, m)$$

$$\cdot \int_z^{\infty} r dr P_{1_{-\mathbf{k}}}^{-\mu+m}\left(\frac{z}{r}\right) P_{1_{-\bar{\mathbf{k}}}}^{\mu-m}\left(\frac{z}{r}\right) g_{\mathbf{k}}^{\mu}(r) g_{\bar{\mathbf{k}}}^{\mu}(r) \Big) .$$

am Ladungsschwerpunkt ein Dichteminimum (siehe Bild 24). Die beiden gleichgroßen Maxima liegen bei $S \pm 500\text{fm}$. Wie in den Bildern 21, 22 und 23 ist die Dichteverteilung am Ladungsschwerpunkt ab $R_{TC}=500\text{fm}$ nicht mehr symmetrisch. Zuerst lokalisiert sich das größere Maximum an den Blei-Kern ($R_{TC}=500\text{fm}$), dann verschiebt es sich zu dem Cm-Kern ($R_{TC}=2000\text{fm}$ bzw. $R_{TC}=3000\text{fm}$). Der molekulare $2p_{\frac{3}{2}}^{\sigma}$ Zustand des Pb-Cm-Quasimoleküls geht allmählich in den atomaren $2p_{\frac{3}{2}}^{\sigma}$ Zustand des Cm-Atoms über. Die Dichteverteilung des $2p_{\frac{3}{2}}^{\sigma}$ Zustandes im Bild 25 zeigt wiederum ein anderes Verhalten. Das Maximum der Elektronendichte ist bis ca. $R_{TC}=1000\text{fm}$ um den Ladungsschwerpunkt symmetrisch verteilt. Ab $R_{TC}=2000\text{fm}$ bewegt sich das Maximum langsam zum Cm-Kern hin. Bis $R_{TC}=3000\text{fm}$ hat sich die molekulare Eigenschaft des $2p_{\frac{3}{2}}^{\sigma}$ Zustandes kaum verändert. In den Bildern 26-28 sind die Elektronendichteverteilungen nur noch für zwei Abstände ($R_{TC}=18\text{fm}$ und $R_{TC}=3000\text{fm}$) aufgezeichnet worden. Für die fünf untersuchten Zustände $3p_{\frac{1}{2}}^{\sigma}$, $3d_{\frac{3}{2}}^{\sigma}$, $3d_{\frac{3}{2}}^{\pi}$, $3d_{\frac{5}{2}}^{\sigma}$, $3d_{\frac{5}{2}}^{\pi}$ ist die Elektronendichte symmetrisch um den Ladungsschwerpunkt verteilt ($R_{TC}=18\text{fm}$). Alle Zustände zeigen bei $R_{TC}=3000\text{fm}$ noch ihre molekularen Eigenschaften.

In der Dichteverteilung der untersten gebundenen σ - und π -Zustände des Pb-Cm-Quasimoleküls, konnten wir nur bei den zwei am stärksten gebundenen Elektronen ($1s_{\frac{1}{2}}^{\sigma}$, $2p_{\frac{1}{2}}^{\sigma}$) bei $R_{TC}=3000\text{fm}$ den Übergang von molekularen Zuständen zu atomaren Zuständen beobachten.

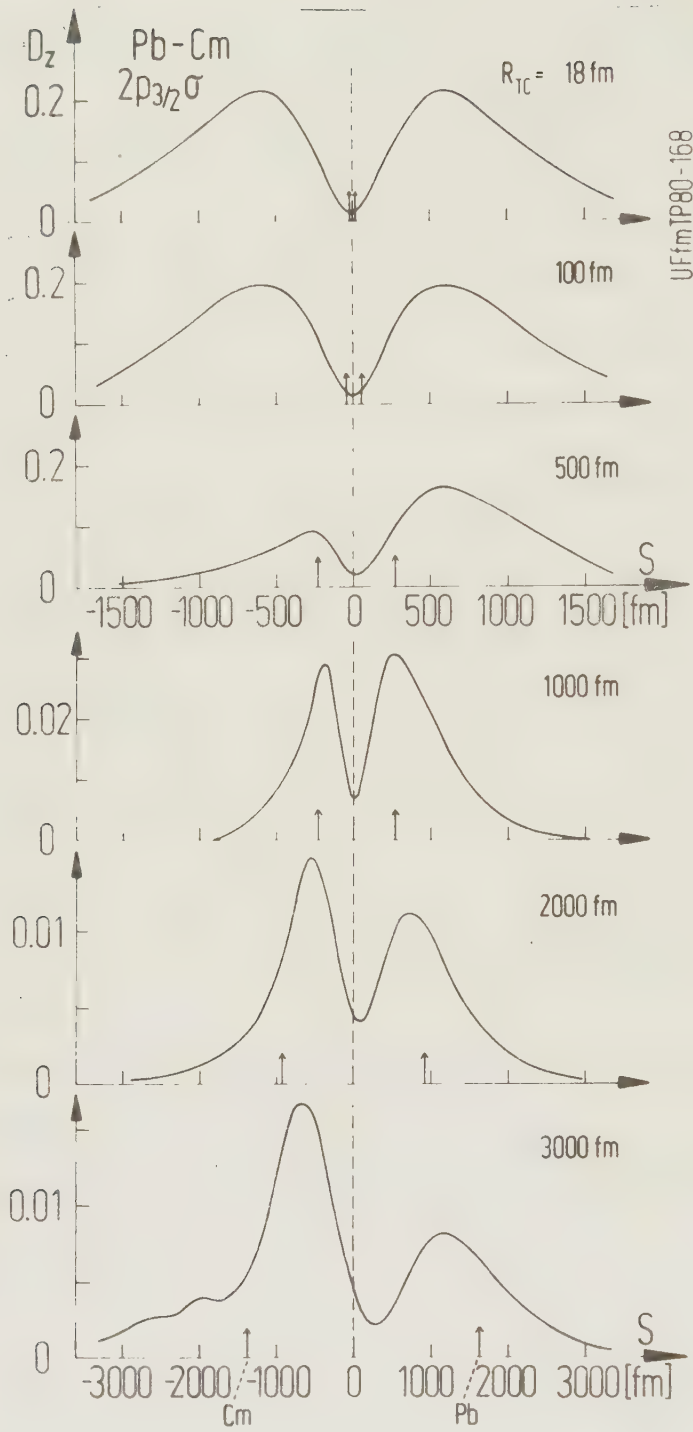


Bild 24: Figurenbeschreibung wie in Bild 21, jedoch für den $2p_{3/2}\sigma$ Zustand.

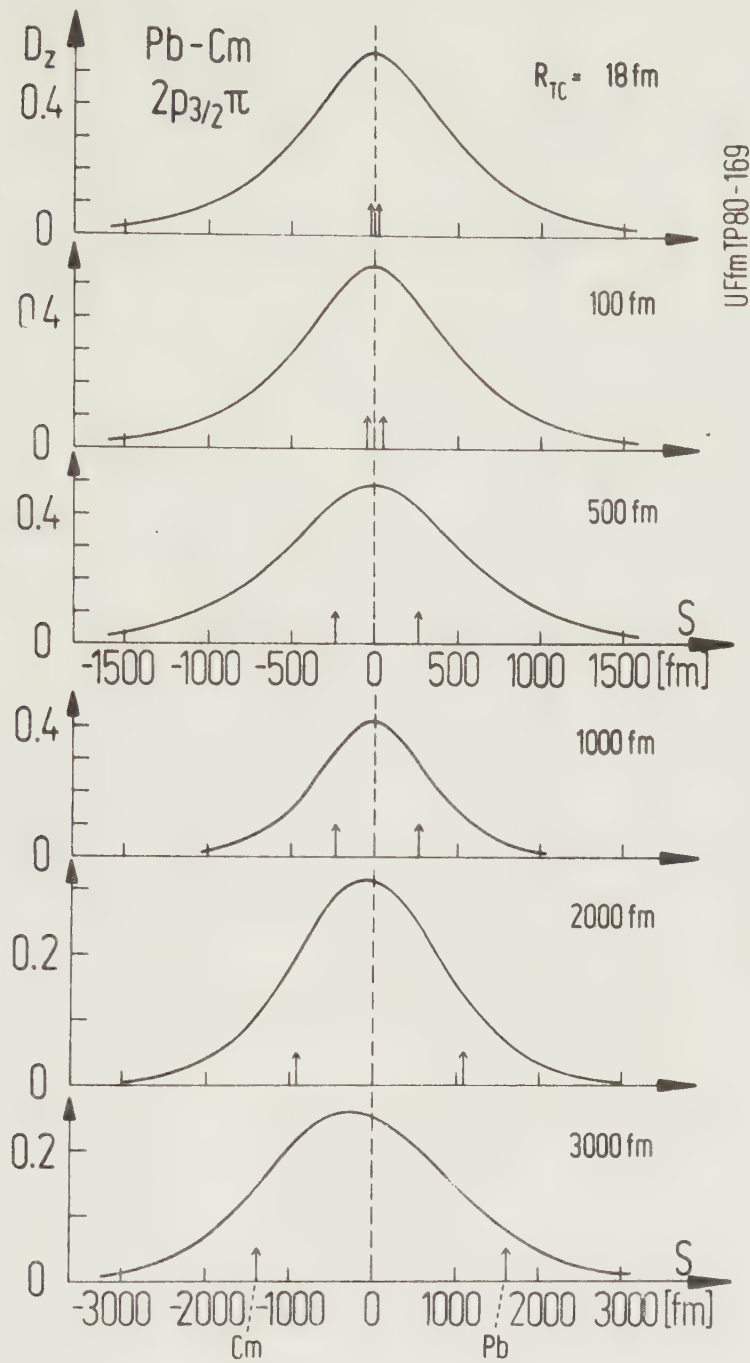


Bild 25: Figurenbeschreibung wie in Bild 21, jedoch
für den $2p_{3/2}\pi$ Zustand.

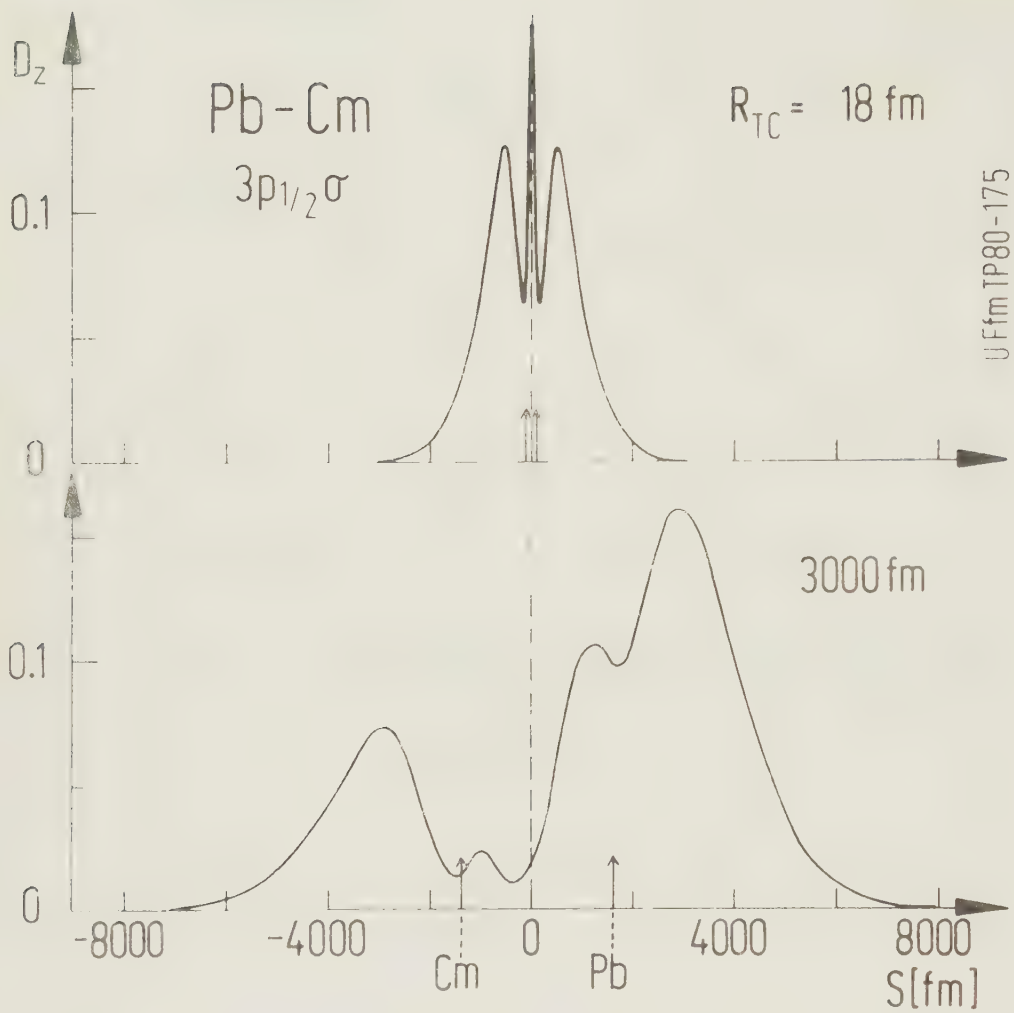


Bild 26: Für den $3p_{1/2}\sigma$ Zustand des Pb-Cm-Quasimoleküls sind für zwei Zweizentrenabstände R_{TC} die Elektronendichte (Ordinate) entlang der internuklearen Achse (Abszisse) aufgetragen. Der Koordinatenursprung ist der Massenschwerpunkt, der auf der Verbindungsachse der beiden Kerne liegt. Die Pfeile symbolisieren den Standort der beiden Kerne.

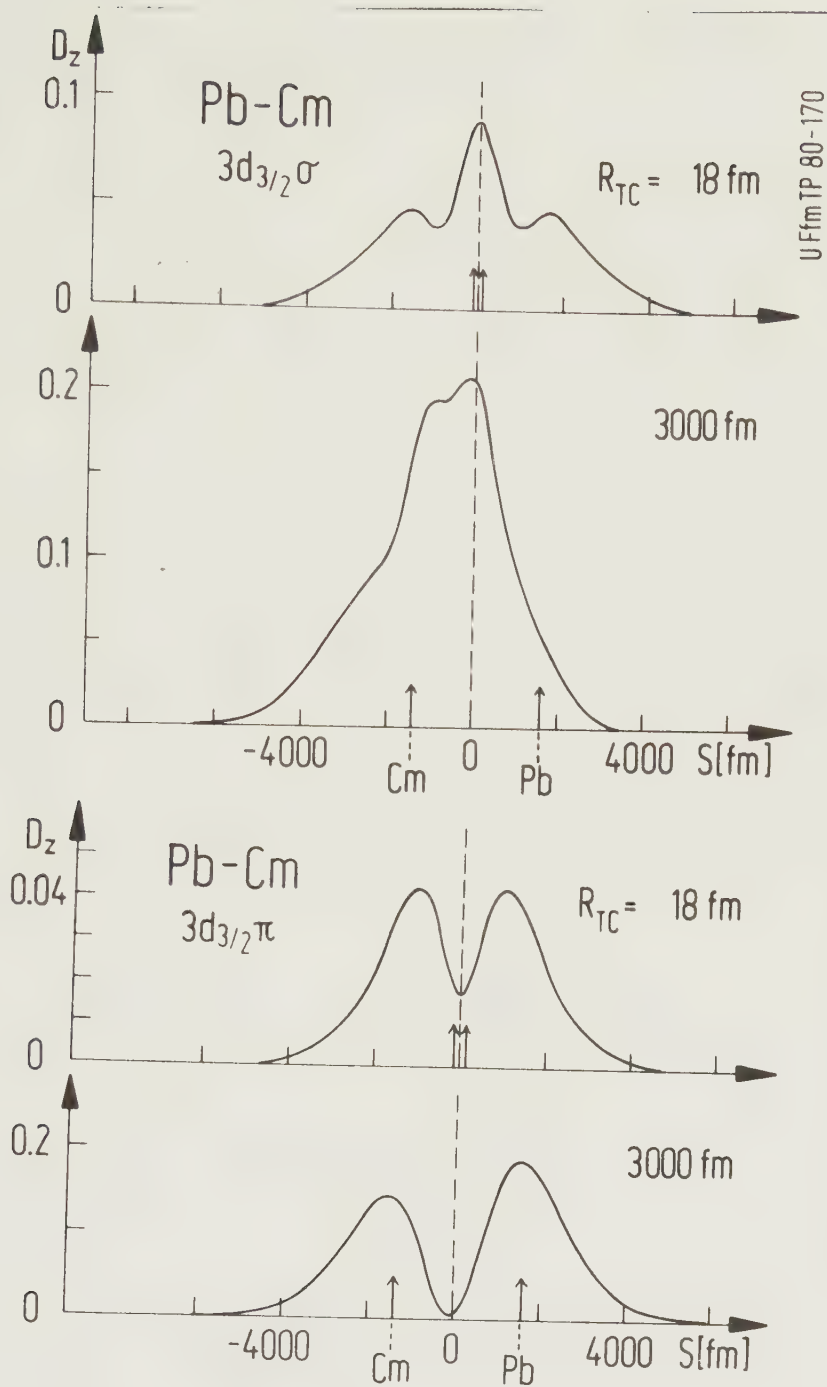


Bild 27: Figurenbeschreibung wie in Bild 26, jedoch für die beiden Zustände $3d_{3/2}\sigma$ und $3d_{3/2}\pi$.

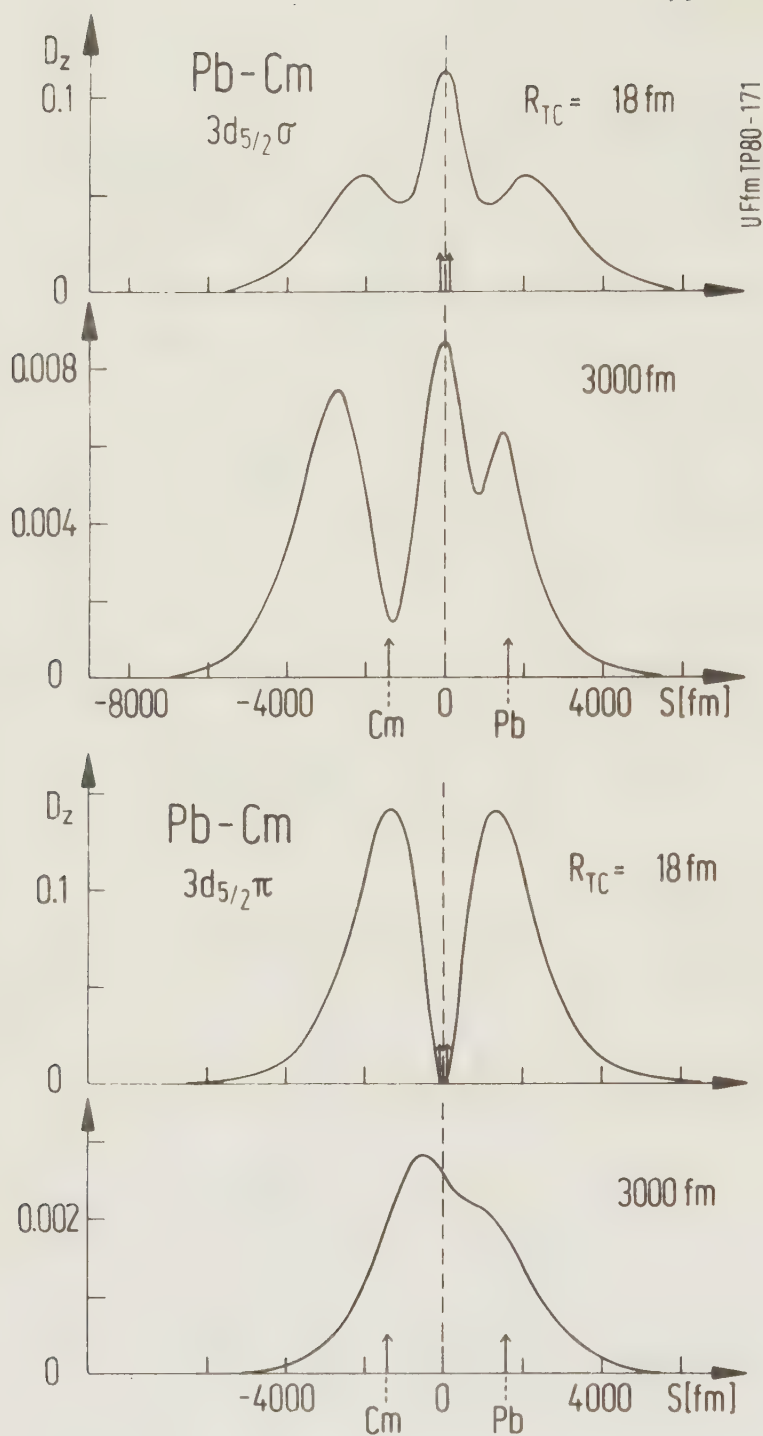


Bild 28: Figurenbeschreibung wie in Bild 26, jedoch für die beiden Zustände $3d_{5/2}\sigma$ und $3d_{5/2}\pi$.

Werden nun atomare Zustände durch eine molekulare Basis beschrieben, wie es bei unserer Lösung der Zweizentren-diracgleichung der Fall ist, dann müssen diese atomaren Wellenfunktionen in dynamischen Rechnungen durch entsprechende Translationskoeffizienten⁷⁴ korrigiert werden. Alle höheren Zustände des Pb-Cm-Systems zeigen bei $R_{TC}=3000\text{fm}$ noch ein molekulares Verhalten.

Diese Zustände werden durch eine molekulare Basis gut beschrieben. Die für die Korrektur der atomaren Wellenfunktionen in einer molekularen Basis benötigten Translationskoeffizienten sind vernachlässigbar. Dies hat zur Folge, daß die Korrektur der Kopplungsmatrixelemente durch die Translationskoeffizienten im Pb-Cm-System bei $R_{TC}=3000\text{fm}$ sehr klein sind.

V.3 Die symmetrischen Zweizentrensysteme

In den Bildern 29-31 untersuchen wir von 6 Zuständen die Elektronendichteverteilung des symmetrischen Pb-Pb-Quasimoleküls. Der Unterschied zum Pb-Cm-System besteht in der symmetrischen Verteilung der Elektronendichte um den Ladungsschwerpunkt, gleich welche Abstände R_{TC} betrachtet werden. Aus der Theorie der symmetrischen Korrelationsdiagramme wissen wir, daß im Zweizentrensystem keiner der beiden Partner bevorzugt werden kann. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen ist um beide Zentren gleich groß. Die Verschiebung der Maxima in der Dichte-

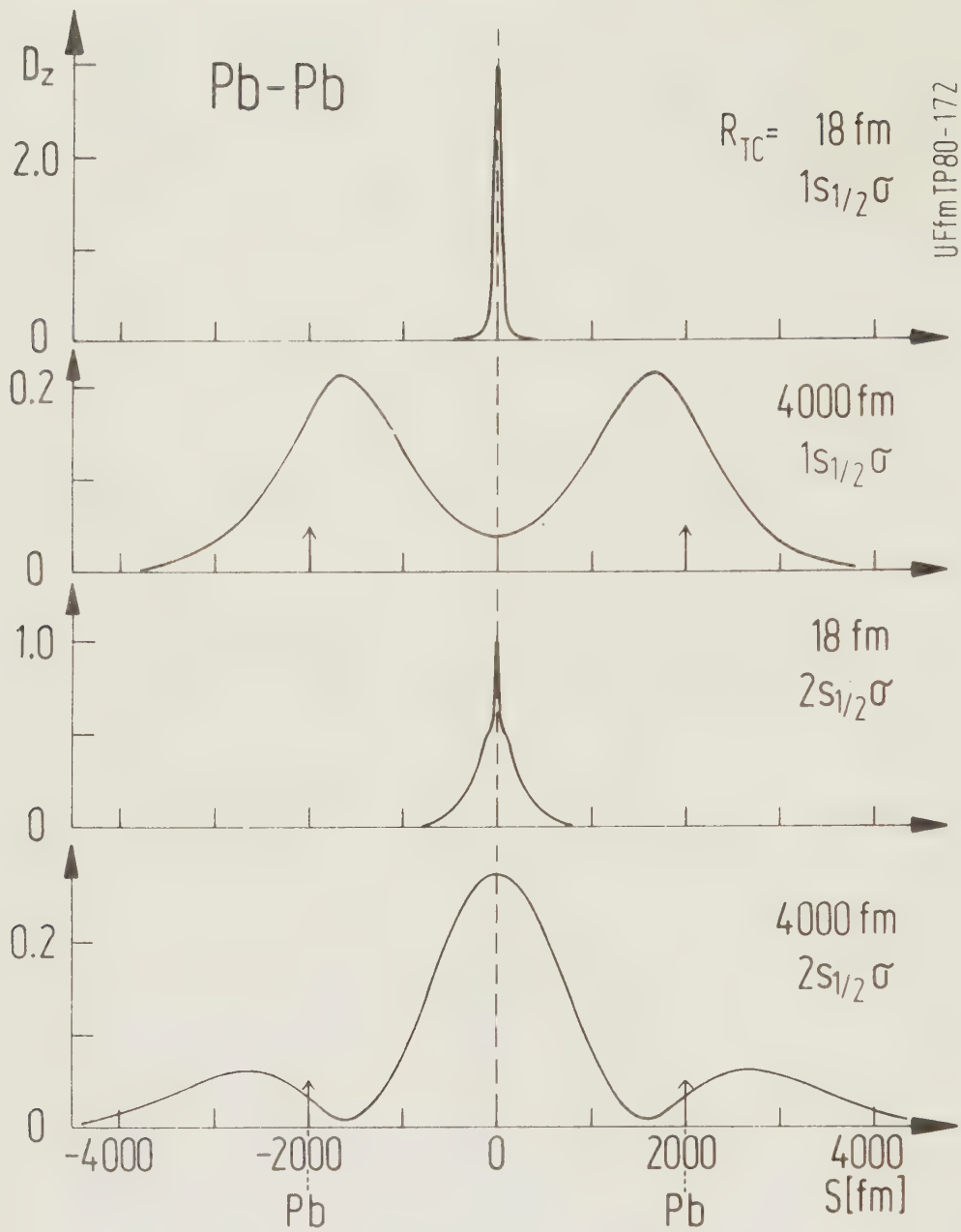


Bild 29: Figurenbeschreibung wie in Bild 26, jedoch für die beiden Zustände $1s_{1/2} \sigma$ und $2s_{1/2} \sigma$ des Pb-Pb-Quasimoleküls.

verteilung der $1s\sigma$, $2s\sigma$ (Bild 29), $2p\frac{1}{2}\sigma$, $2p\frac{3}{2}\sigma$ (Bild 30) und $2p\frac{3}{2}\pi$ (Bild 31) Zustände ($R_{TC}=4000\text{fm}$) von den Blei-Kernen zum Ladungsschwerpunkt hin, liegt am wechselseitigen attraktiven Einfluß der Blei-Kerne. Die beiden bei $R_{TC}=4000\text{fm}$ am stärksten gebundenen Elektronen ($1s\sigma, 2p\frac{1}{2}\sigma$) sind schon von einem molekularen Zustand in den atomaren Zustand übergegangen.

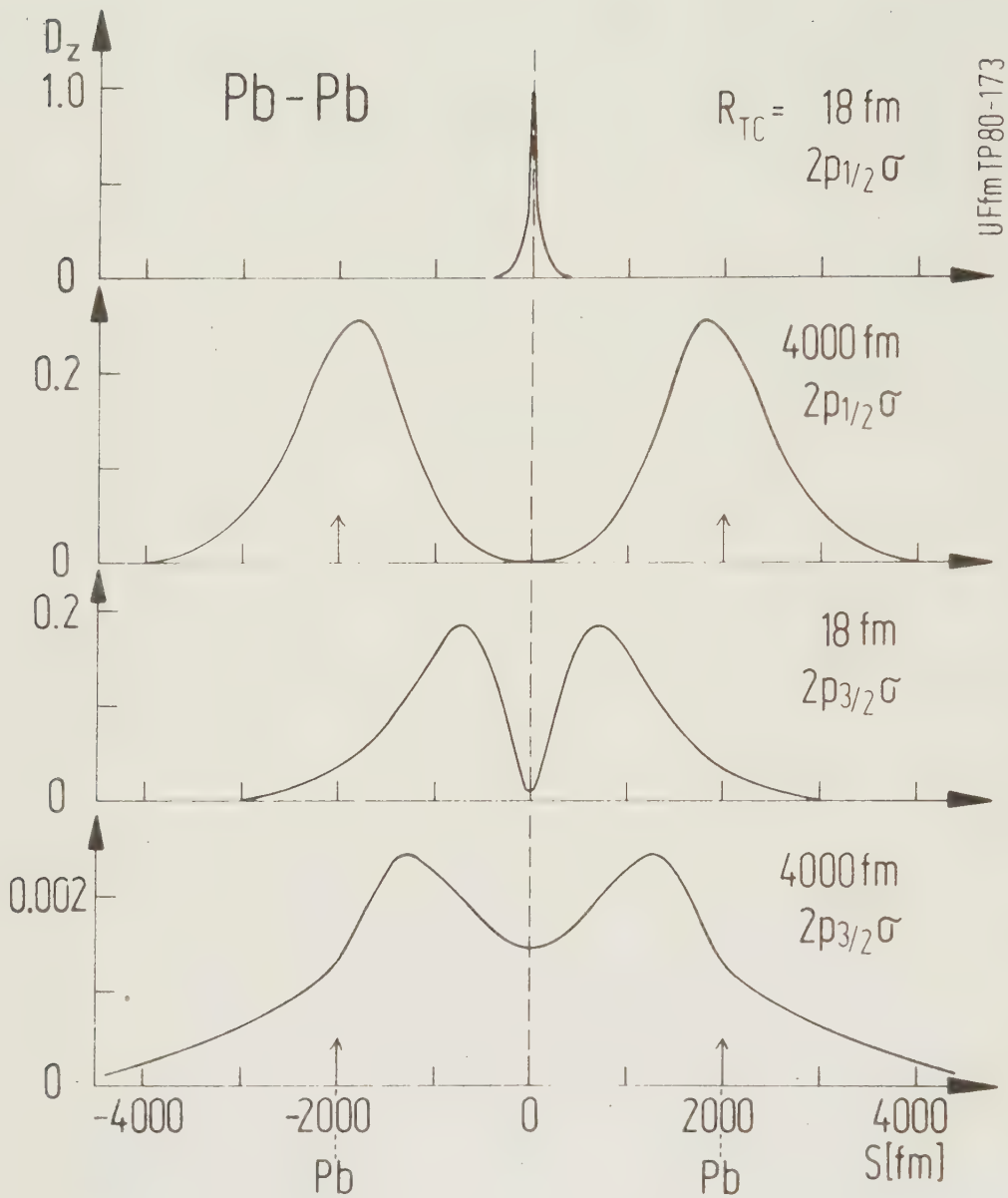


Bild 3o: Figurenbeschreibung wie im Bild 26, jedoch für die beiden Zustände $2p_{\frac{1}{2}} \sigma$ und $2p_{\frac{3}{2}} \sigma$ des Pb-Pb-Quasimoleküls.

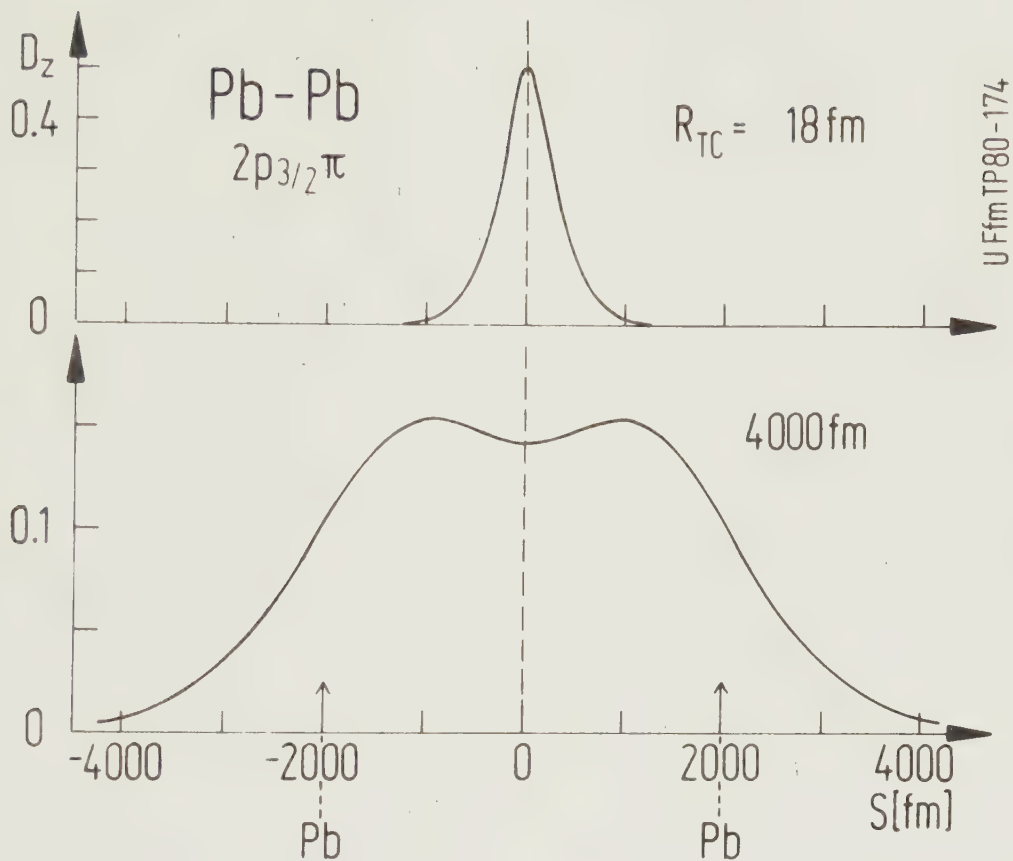


Bild 31: Figurenbeschreibung wie in Bild 26, jedoch für den $2p_{3/2}\pi$ Zustand des Pb-Pb-Quasimoleküls.

VI. Radiale Komponenten der quasimolekularen Wellenfunktionen

Das Verfahren zur Lösung der Zweizentrendiracgleichung beruht auf der Entwicklung des Zweizentrenpotentials und der Wellenfunktionen nach Multipolen. Im Abschnitt IV.4 verglichen wir die Ergebnisse (Bindungsenergien) der Monopolnäherung mit den Multipolrechnungen. Wir stellten sowohl für symmetrische als auch asymmetrische Quasimoleküle fest, daß die $s_{\frac{1}{2}}$ und $p_{\frac{1}{2}}$ Zustände bis zu einem Zweizentrenabstand von ca. $R=400\text{fm}$ in beiden Lösungsmethoden gut übereinstimmten. Wollen wir jedoch die Zweizentrendiracgleichung für größere Abstände berechnen, dann können wir die Monopolnäherung nicht mehr verwenden. Wir müssen die Anzahl der Entwicklungsterme des Zweizentrenpotentials erhöhen. Damit erhöht sich gleichzeitig die Anzahl der Komponenten der Wellenfunktion. Diese Annahme wurde durch die Untersuchungen der Elektronendichteverteilungen im vorhergehenden Kapitel bestätigt. Wir fanden, daß die symmetrische Verteilung der Dichtemaxima bei $R \sim 500\text{fm}$ sich leicht vom Ladungsschwerpunkt verschiebt, d.h., die Kugelsymmetrie des quasimolekularen Zustandes verschwindet.

In diesem Abschnitt untersuchen wir nun in Abhängigkeit

von R den prozentualen Anteil der einzelnen radialen Komponenten zur Gesamtwellenfunktion.

Bei den verbotenen Energiekreuzungen in den Korrelationsdiagrammen kreuzen die Wellenfunktionen. Wir untersuchen nun die radialen Komponenten der Wellenfunktion entlang der Energiekurven. Es ist deshalb sinnvoll, die molekulare Notation der Zustände zu verwenden (siehe Kapitel III.3). Zum besseren Verständnis der nachfolgenden Bilder haben wir nur für die σ -Zustände einen Teil des Nb-Nb-Korrelationsdiagrammes im linearen Maßstab herausgezeichnet (siehe Bild 32). Unterhalb des Niveaudiagrammes sind die sich verändernden Mischungsverhältnisse der radialen Komponenten $f_{\kappa}(r)$ des $2\Sigma_g$, $3\Sigma_g$ und $4\Sigma_g$ dargestellt. Der prozentuale Anteil der radialen Komponenten der Zweizentrenwellenfunktion ist durch

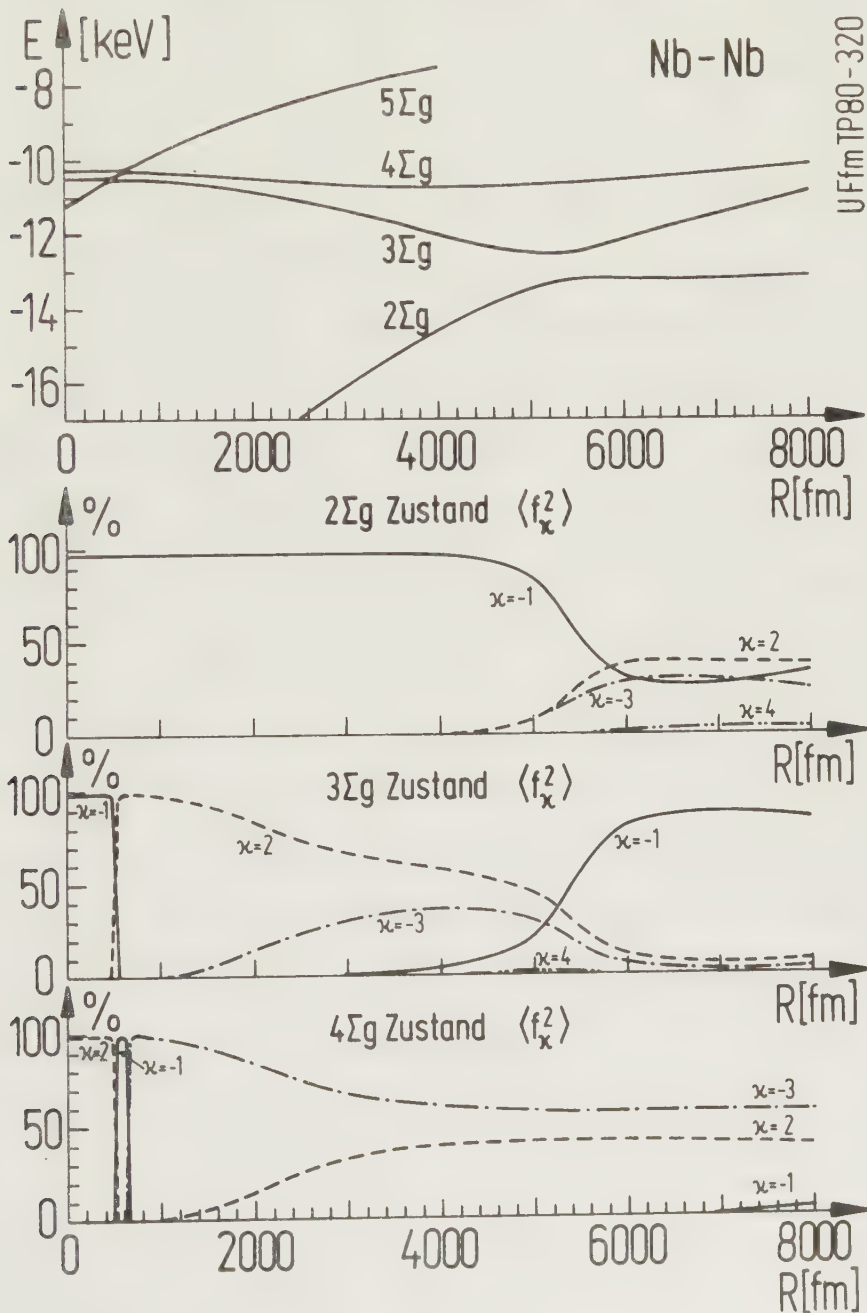
$$\frac{\int_0^{\infty} r^2 f_{\kappa}^2 dr}{\sum_{\kappa} \int_0^{\infty} r^2 (f_{\kappa}^2 + g_{\kappa}^2) dr} = \int_0^{\infty} r^2 f_{\kappa}^2 dr = \langle f_{\kappa}^2 \rangle \quad (\text{VI.1})$$

bestimmt worden.

$f_{\kappa}(r)$ ist die "große" Komponente, $g_{\kappa}(r)$ die "kleine" Komponente des Wellenfunktionsspinors (II.3). Der $2\Sigma_g$ Zustand hat bei $R \sim 5500 \text{ fm}$ eine verbotene Kreuzung mit dem $3\Sigma_g$ Zustand. Der $2\Sigma_g$ Zustand entspricht dem $2s\sigma$ Niveau, der $3\Sigma_g$ in diesem Bereich dem $3d\frac{3}{2}\sigma$. Betrachten

wir den prozentualen Anteil der radialen Komponenten, so ist für den $2\Sigma g$ Zustand der Term mit $\kappa=-1(s\frac{1}{2})$ der f-Komponente bis zur verbotenen Kreuzung mit dem $3\Sigma g$ Zustand dominant. Ab der verbotenen Kreuzung beobachten wir zwei weitere Beimischungen der $\kappa=2(d\frac{3}{2})$ und $\kappa=-3(d\frac{5}{2})$ Terme. Der $\kappa=4(g\frac{7}{2})$ Term der f-Komponente und die g-Komponenten tragen zur Gesamtwellenfunktion kaum etwas bei. Die Mischungsverhältnisse der f-Komponente des $3\Sigma g$ Zustandes ändern sich laufend (Bild 32b). Bis etwa $R\sim 500\text{fm}$ entspricht dem $3\Sigma g$ Niveau der $3s\sigma$ -Zustand. Deshalb ist die f-Komponente mit $\kappa=-1$ dominant. Der Monopolterm der Zweizentrenwellenfunktion reicht zur Beschreibung der Gesamtwellenfunktion aus. Im Kreuzungsbereich schaltet sich der $\kappa=2$ Term hinzu. Im gleichen Maße nimmt der $\kappa=-1$ Term ab. Der $\kappa=2$ Term wird dominant. Wir sehen, daß während der verbotenen Kreuzungen sich einerseits die Energiekurven ausweichen, andererseits jedoch die Wellenfunktionen kreuzen. Die Änderung der prozentualen Mischungsverhältnisse der Entwicklungsterme entlang der Energiekurven verläuft stetig. Bei $R\sim 1000\text{fm}$ tritt noch ein zweiter Term ($\kappa=-3$) in Erscheinung. Die nächste allmähliche Veränderung bei $R\sim 5500\text{fm}$ dokumentiert eine verbotene Kreuzung. Die f-Komponente mit $\kappa=-1$ wird danach dominant. Die Veränderung der Mischungsverhältnisse erstreckt sich über einen Abstandsbereich von $\sim R\ 1000\text{fm}$.

Bild 32: a) Ausschnitt aus dem Nb-Nb-Korrelationsdiagramm
(Bild 13) für vier Σg Zustände (molekulare Notation)
b) Der prozentuale Anteil der radialen Komponente
 f_{κ} entlang des $2\Sigma g$ Zustandes in Abhängigkeit
des Zweizentrenabstandes R.
c) wie in b), jedoch entlang des $3\Sigma g$ Energieniveaus
d) wie in b), jedoch entlang des $4\Sigma g$ Energieniveaus.



In der dazugehörenden Kreuzung sehen wir, daß der Energieabstand zwischen den beiden Niveaus etwa $\Delta E \sim 1 \text{ keV}$ beträgt. Der Kreuzungsbereich ist langgestreckt. Im Gegensatz dazu ist der Energieabstand der verbotenen Kreuzung bei $R \sim 500 \text{ fm}$ zwischen den $3\Sigma_g$ und $4\Sigma_g$ Zuständen sehr klein ($\Delta R \sim 40 \text{ fm}$, $\Delta E \sim 0,05 \text{ keV}$). Die Mischungsverhältnisse der f-Komponente ändern sich innerhalb sehr kleiner Zweizentrenabstände sehr rasch. Dies können wir besonders deutlich am $4\Sigma_g$ Zustand erkennen (Bild 32 d), der kurz hintereinander bei $R \sim 500 \text{ fm}$ und $R \sim 600 \text{ fm}$ zwei verbotene Kreuzungen aufweist. Diese beiden Kreuzungen sind in der aufeinander folgenden Änderung der $\kappa = -1$ Komponente zu erkennen. Bei $R \sim 460 \text{ fm}$ wächst der $\kappa = -1$ Term bis zu einem Anteil von ca. 98% an der Gesamtwellenfunktion an, um dann innerhalb von $\Delta R \sim 20 \text{ fm}$ zu verschwinden. Bei großen Zweizentrenabständen bilden die zwei f-Komponenten $\kappa = 2, -3$ über 98% der Gesamtwellenfunktion.

In Bild 33 ist ein Ausschnitt aus dem Pb-Cm-Korrelationsdiagramm im linearen Maßstab herausgezeichnet. Es wurden nur die Σ -Zustände berücksichtigt. Die Bezeichnung der Zustände richtet sich nach den Energieniveaus (molekulare Klassifikation der quasimolekularen Zustände). Wir haben sowohl die f-als auch die g-Komponenten untersucht, da im Gegensatz zum nichtrelativistischen Nb-Nb-System die Ent-

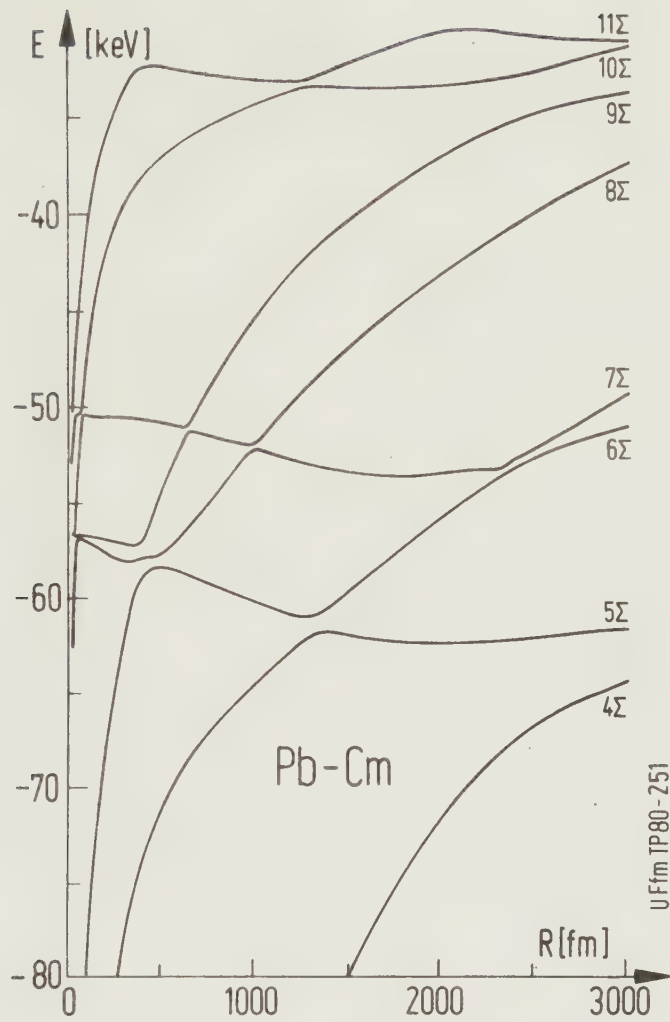


Bild 33: Ausschnitt aus dem Pb-Cm-Korrelationsdiagramms
(Bild 14). Es wurden nur sieben Σ Zustände ge-
zeichnet (molekulare Notation).

wicklungsterme der "kleinen" radialen Komponente g nicht immer kleiner als 1% sind. Bei kleinen Zweizentrenabständen ($R \sim 20 \text{ fm}$) kann der Anteil der g -Komponenten zur Gesamtwellenfunktion bis zu 10% betragen. Zu größeren Abständen hin (ab $R \sim 50 \text{ fm}$) wird der Beitrag der g -Komponenten zur Gesamtwellenfunktion kleiner als 3%. Deshalb werden wir bei der Untersuchung der prozentualen Mischungsverhältnisse der radialen Komponenten des relativistischen Quasimoleküls Pb-Cm nur die f -Komponenten untersuchen. In den Bildern 34-36 sind die radialen Entwicklungsterme des 6Σ , 7Σ und 8Σ Zustandes in ihrem prozentualen Anteil an der Gesamtwellenfunktion aufgezeichnet. Es wurden bei der Berechnung der Zustände sechs Entwicklungsterme verwendet ($\kappa = -1, 1, -2, 2, -3, 3$). Der 6Σ Zustand (Bild 34) hat die verbotenen Kreuzungen bei $R \sim 40 \text{ fm}$, $R \sim 126 \text{ fm}$ und $R \sim 240 \text{ fm}$ (siehe Tabelle 9). Die zum 6Σ Niveau gehörende Wellenfunktion ist bis $R \sim 40 \text{ fm}$ eine $3s_{\frac{1}{2}}$ Wellenfunktion. Zwischen $R \sim 40 \text{ fm}$ und $R \sim 125 \text{ fm}$ eine $3d_{\frac{3}{2}}_{\frac{5}{2}}$ -, zwischen $R \sim 125 \text{ fm}$ und $R \sim 240 \text{ fm}$ eine $3p_{\frac{3}{2}}_{\frac{5}{2}}$ - und ab $R \sim 240 \text{ fm}$ eine $3d_{\frac{5}{2}}_{\frac{3}{2}}$ -Wellenfunktion. Die Mischungsverhältnisse der radialen Komponenten zeigen die Änderung der Wellenfunktion entlang der Energiekurve 6Σ . Bis $R \sim 35 \text{ fm}$ wird ca. 90% der Zweizentrenwellenfunktion durch die f -Komponente $\kappa = -1$ beschrieben. Alle weiteren Kreuzungen sind durch die rasche Änderung der Mischungsverhältnisse der radialen Komponenten zu beobachten.

Zwischen $R \sim 450 \text{ fm}$ und $R \sim 1300 \text{ fm}$ überwiegt der $\kappa = 2(d_{\frac{3}{2}})$ Term. Er wird von den $\kappa = -2(p_{\frac{3}{2}})$ und $\kappa = 1(p_{\frac{1}{2}})$ Termen abgelöst. Ab $R \sim 2400 \text{ fm}$ wachsen die beiden Terme $\kappa = -3(d_{\frac{5}{2}})$ und $\kappa = 2(d_{\frac{3}{2}})$ bis zu einem Anteil von ca. 95% an der Gesamtwellenfunktion an. Ist der Energieabstand zwischen den Zuständen einer verbotenen Kreuzung groß, dann ändern sich die Anteile der Multipolterme der Wellenfunktion nur allmählich. Ist die Energiedifferenz sehr klein, so ändern sich die radialen Komponenten innerhalb kleiner Zweizentrenabstandsänderungen sehr schnell. Der prozentuale Anteil der einzelnen Komponenten an der Zweizentrenwellenfunktion ist in Bild 35 für den 7Σ und in Bild 36 für den 8Σ Zustand des Pb-Cm-Systems dargestellt. Auch hier können wir die verbotenen Kreuzungen anhand der sich radial verändernden Mischungsverhältnisse beobachten.

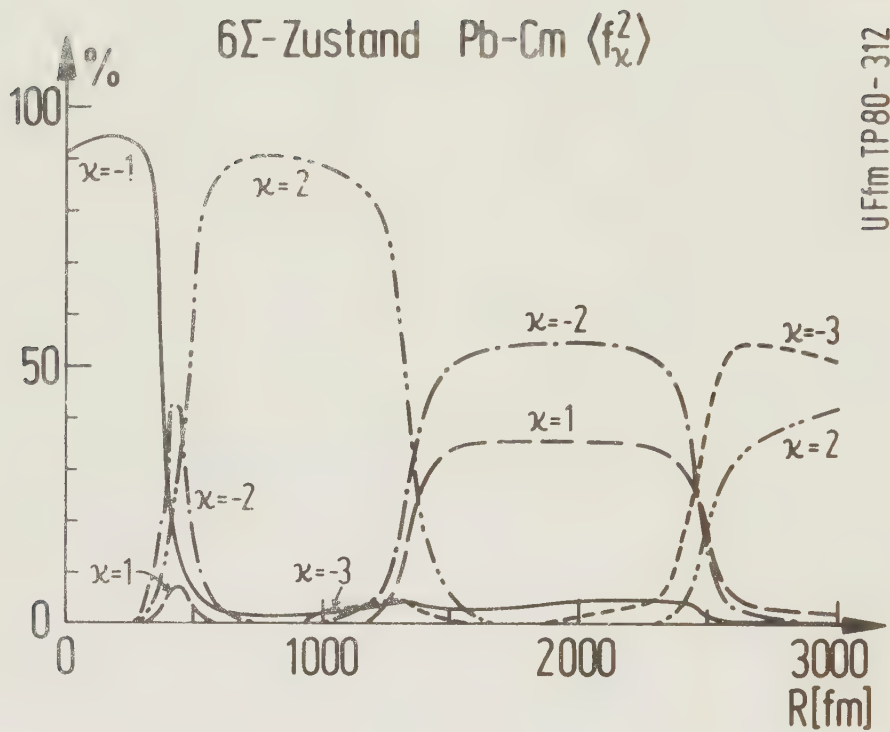


Bild 34: Der prozentuale Anteil der radialen Komponente f_{κ} entlang des 6Σ Zustandes des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand R .

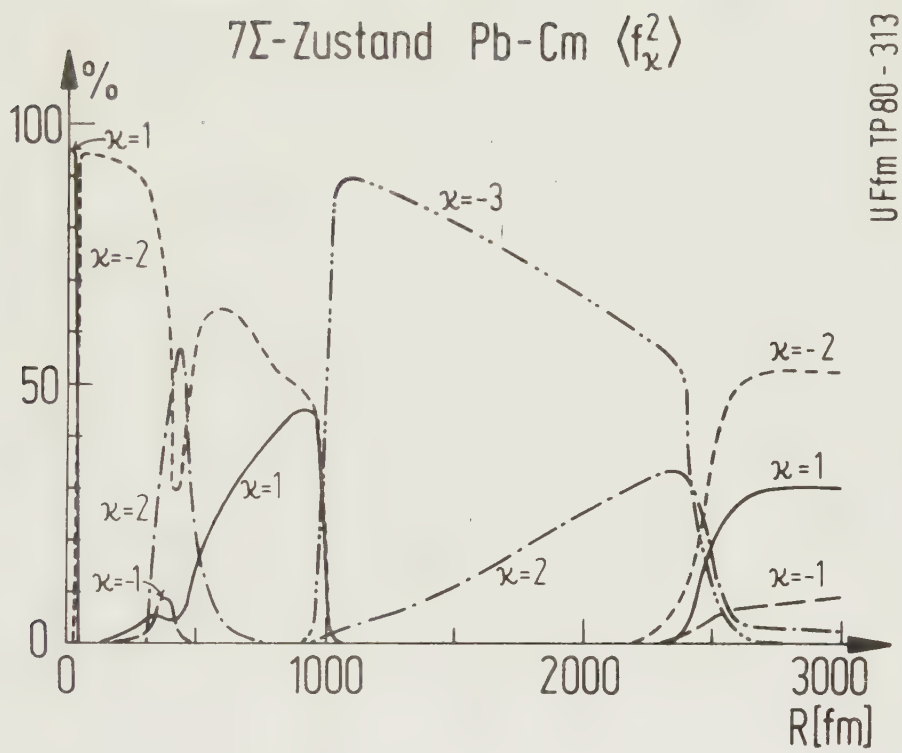


Bild 35: Figurenbeschreibung wie in Bild 34, jedoch entlang des 7Σ Zustandes.

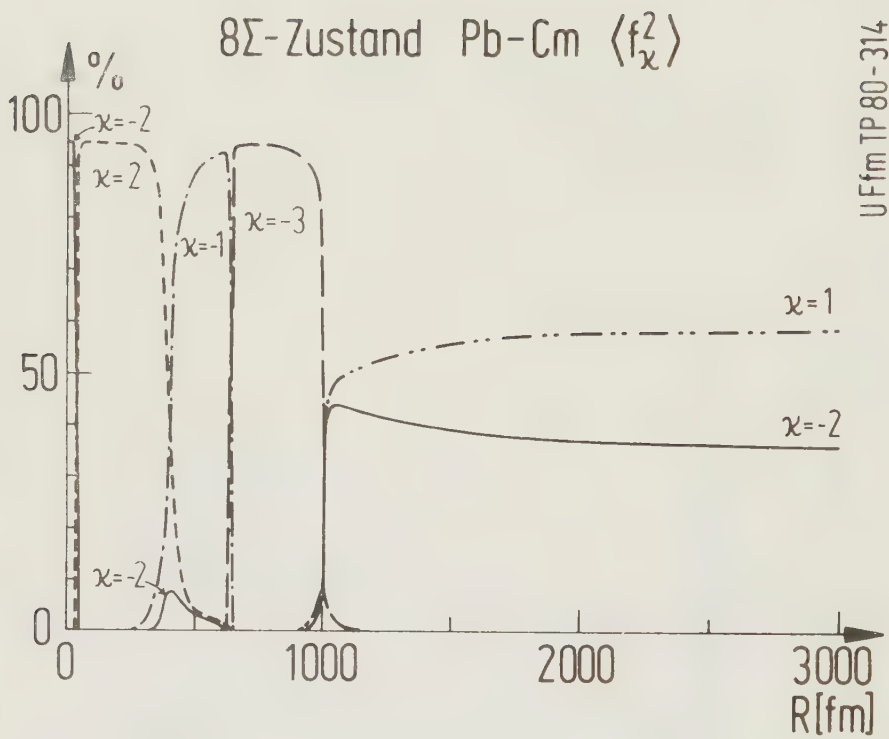


Bild 36: Figurenbeschreibung wie in Bild 34, jedoch entlang des 8Σ Zustandes.

VII. Kopplungsmechanismen in quasimolekularen Stößen von sehr schweren Ionen

In den letzten Kapiteln haben wir die Lösungen der stationären Zweizentrendiracgleichung für Einelektronensysteme diskutiert. Die Quasimoleküle entstehen jedoch in dynamischen Prozessen, so daß wir zur theoretischen Beschreibung der quasimolekularen Röntgenspektren, K-Schalenionisation und der Anisotropie der MO-Röntgenstrahlung von der zeitabhängigen Diracgleichung ($\hbar=c=1$)

$$i \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}_{\text{Dirac}} \psi(\vec{r}, t) \quad (\text{VII.1})$$

ausgehen müssen.

Entwickeln wir die Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$ in einem vollständigen Satz von Basiszuständen (I.2), so erhalten wir einen unendlichen Satz von gekoppelten Kanalgleichungen (I.3)

$$\dot{a}_f(r) = - \sum_{i \neq f} a_i(t) \langle \phi_f | \frac{\partial}{\partial t} | \phi_i \rangle e^{i \int_{-\infty}^t dt' (E_f - E_i)} \quad (\text{VII.2})$$

Wie wir wissen, läßt sich der $\frac{\partial}{\partial t}$ Operator in eine radiale Kopplung und eine Rotationskopplung aufteilen

$$\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \dot{R} \frac{\partial}{\partial R} - i \vec{\omega} \cdot \vec{j}, \quad (\text{VII.3})$$

wobei $\vec{\omega}$ die Winkelgeschwindigkeit der internuklearen

Achse und $\vec{j}$ der Drehimpulsoperator des Elektrons ist.

Die beiden Operatoren haben unterschiedliche Drehimpuls-
auswahlregeln. Die radiale Kopplung $\frac{\partial}{\partial R}$ wirkt nur zwischen
Zuständen mit gleicher magnetischer Quantenzahl μ . Die
Anfangs- und Endzustände der Rotationskopplung unter-
scheiden sich in der magnetischen Quantenzahl um ± 1 .

In Kapitel VII.1 werden wir die radialen Matrixelemente,
in Kapitel VII.2 die Rotationsmatrixelemente symmetrischer
und asymmetrischer Quasimoleküle studieren. Wir werden
ausführlich die asymmetrischen Zweizentrensysteme Pb-Cm
und U-Cm diskutieren, und den Unterschied zwischen
relativistischen asymmetrischen Quasimolekülen und
relativistischen und nichtrelativistischen symmetrischen
Zweizentrensystemen (Pb-Pb, Nb-Nb) aufzeigen.

Die Resultate werden mit der Monopolnäherung verglichen.
In Kapitel VII.3 werden wir beide Kopplungsarten gegen-
überstellen.

VII.1 Die radialen Matrixelemente

Nach der Lösung der Zweizentrendiracgleichung können wir die radiale Kopplung berechnen. Mit Hilfe des Hellmann-Feynman-Theorems⁷⁵ erhalten wir für die radialen Matrixelemente

$$\begin{aligned} \langle \phi_n | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_m \rangle &= (E_m - E_n)^{-1} \langle \phi_n | [\frac{\partial}{\partial R}, H_{TC}] | \phi_m \rangle \\ &= (E_m - E_n)^{-1} \langle \phi_n | \frac{\partial V_{TC}}{\partial R} | \phi_m \rangle, \end{aligned} \quad (\text{VII.4})$$

wobei V_{TC} das Zweizentrenpotential und ϕ_n und ϕ_m die relativistischen Zweizentrenwellenfunktionen sind.

VII.1a Die radialen Matrixelemente der Quasimoleküle für Punktkerne

Wie bei der Lösung der Zweizentrendiracgleichung entwickeln wir das Zweizentrenpotential nach Multipolen (siehe Kapitel II.4.a)

Es gilt

$$\frac{\partial V_{TC}}{\partial R} = \sum_1 \frac{\partial V_1}{\partial R} P_1(\cos \vartheta). \quad (\text{VII.5})$$

Wählen wir als Koordinatenursprung den Massenschwerpunkt (siehe Bild 6) und differenzieren die Multipolterme des Potentials nach dem Zweizentrenabstand, so erhalten wir⁴³

$$\begin{aligned} r &\leq S_i \\ \frac{\partial V_1}{\partial R} &= \sum_{i=1}^2 \alpha_i \epsilon_i Z_i e^2 (1+1) \frac{r^1}{S_i^{1+2}} \end{aligned} \quad (\text{VII.6a})$$

$$r > S_i \quad (\text{VII.6.b})$$

$$\frac{\partial V_1}{\partial R} = \sum_{i=1}^2 -\alpha_i \epsilon_i Z_i e^2 \frac{S_i^{l+1}}{r^{l+1}},$$

mit

$$\alpha_i = \begin{cases} \frac{M_2}{M_1 + M_2} & \text{für } i=1 \\ \frac{M_1}{M_1 + M_2} & \text{für } i=2, \end{cases} \quad (\text{VII.7})$$

$$\epsilon_i = \begin{cases} 1 & \text{für } i=1 \\ (-1)^l & \text{für } i=2, \end{cases} \quad (\text{VII.8})$$

und $S_i = \alpha_i \cdot R$ (R = Zweizentrenabstand).

Wählen wir als Anfangszustand

$$|\phi_{i\mu}(\vec{r})\rangle = \sum_{\vec{k}} \begin{pmatrix} f_{\mu\vec{k}}(r) \chi_{\vec{k}}^{\mu} \\ g_{\mu\vec{k}}(r) \chi_{-\vec{k}}^{\mu} \end{pmatrix} \quad (\text{VII.9})$$

und als Endzustand

$$\langle \phi_{f\mu}(\vec{r}) | = \sum_{\mu\vec{k}} (f_{\mu\vec{k}}(r) \chi_{\vec{k}}^{\mu+}, -ig_{\mu\vec{k}}(r) \chi_{-\vec{k}}^{\mu+}) \quad (\text{VII.10})$$

(die radialen Komponenten der Zweizentrenwellenfunktion sind reell), so ergibt sich für das radiale Matrixelement die Beziehung:

$$\langle \phi_{f\mu}(\vec{r}) | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_{i\mu}(\vec{r}) \rangle = \frac{\delta_{\mu\bar{\mu}}}{(E_i - E_f)} \quad (\text{VII.11})$$

$$\begin{aligned} & * \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{\kappa, \bar{\kappa}} \left(A_{(\kappa, l, \bar{\kappa})}^{\mu} \int_0^{\infty} r^2 dr F_{\mu\kappa}(r) \frac{\partial V_1}{\partial R} f_{\mu\bar{\kappa}}(r) \right. \\ & \left. + A_{(-\kappa, l, -\bar{\kappa})}^{\mu} \int_0^{\infty} r^2 dr G_{\mu\kappa}(r) \frac{\partial V_1}{\partial R} g_{\mu\bar{\kappa}}(r) \right), \end{aligned}$$

wobei die Koeffizienten $A_{(\kappa, l, \bar{\kappa})}^{\mu}$ mit Hilfe der Drehimpulsalgebra analog zu den gekoppelten radialen Differentialgleichungen (II.8) bestimmt werden. Da durch die Entwicklung des Zweizentrenpotentials nach Multipolen im radialen Integranden der Gl. VII.11 über eine Sprungfunktion integriert wird (nach Gl.VII.6 unterscheiden wir für den $\frac{\partial V}{\partial R}$ Operator zwei Geltungsbereiche), so kommt es bei der numerischen Integration für große Zweizentrenabstände $R \gg 2000 \text{ fm}$ zu Genauigkeitsschwankungen. Denn die am Ursprung ($r \rightarrow 0$) notwendige logarithmische Stützstellenverteilung der radialen Komponenten der Zweizentrenwellenfunktion führt im Sprungbereich des $\frac{\partial V}{\partial R}$ -Operators zu einer verringerten Anzahl der Stützstellen und damit zu einem numerischen Fehler der radialen Matrixelemente für große Zweizentrenabstände von bis zu $10^{-2} [m_e c^2 / \hbar^2]$. Eine Anzahl der radialen Matrixelemente sind jenseits von $R = 2000 \text{ fm}$ kleiner als $10^{-2} [m_e c^2 / \hbar]$. Die Ergebnisse sind deshalb sensitiv auf die Stützstellenverteilung der radialen Wellenfunktionen.

Wir beobachten darum ab $R=2000\text{fm}$ teilweise eine kleine Wellenstruktur in den radialen Matrixelementen. Eine Erhöhung der Stützstellenzahl zur Beseitigung dieser Schwankungen ist aus Speicherplatzgründen des Computers nicht zu empfehlen. Deshalb haben wir in den neueren Rechnungen für die Pb-Cm und U-Cm Quasimoleküle ein anderes Verfahren zur Berechnung der $\frac{\partial}{\partial R}$ Kopplungen erarbeitet. Wir entwickeln jetzt das Zweizentrenpotential nicht mehr nach Multipolen.

Für das Zweizentrenpotential gilt

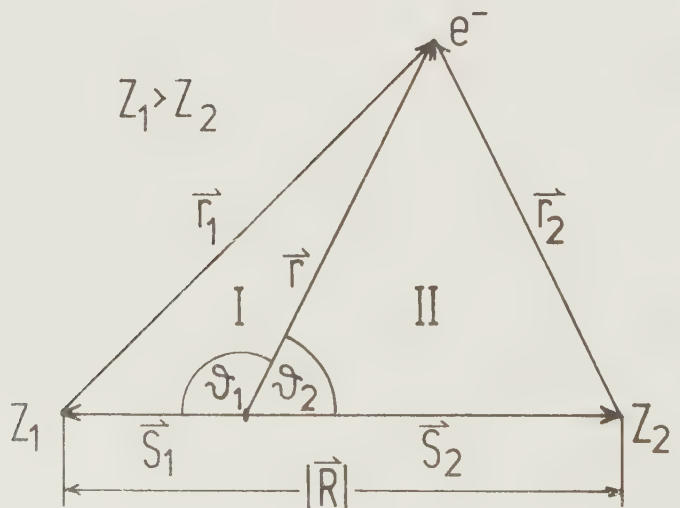
$$V(\vec{r}) = -\frac{Z_1 e^2}{|\vec{r} - \vec{S}_1|} - \frac{Z_2 e^2}{|\vec{r} - \vec{S}_2|} \quad (\text{VII.12})$$

mit

$$\vec{S}_1 = \frac{M_2}{M_1 + M_2} \vec{R} = \alpha_1 \vec{R} \quad \text{und} \quad \vec{S}_2 = -\frac{M_1}{M_1 + M_2} \vec{R} = -\alpha_2 \vec{R}$$

(siehe Bild 37)

Bild 37:



Nach der Vektoraddition in den Dreiecken I und II gilt

$$\vec{S}_1 + \vec{r}_1 = \vec{r} \quad , \quad \vec{S}_2 + \vec{r}_2 = \vec{r} \quad (\text{VII.13})$$

und damit

$$r_1 = |\vec{r} - \vec{S}_1| \quad , \quad r_2 = |\vec{r} - \vec{S}_2| \quad (\text{VII.14})$$

Einsetzen der Gleichungen (14) in (12) liefert

$$\frac{\partial V}{\partial R} = \frac{\partial}{\partial R} \left(- \frac{Z_1 e^2}{r_1} - \frac{Z_2 e^2}{r_2} \right) \quad (\text{VII.15})$$

Mit Hilfe des Kosinussatzes finden wir

$$\begin{aligned} r_1 &= \sqrt{r^2 + S_1^2 - 2rS_1 \cos \vartheta_1} \\ r_2 &= \sqrt{r^2 + S_2^2 - 2rS_2 \cos \vartheta_2} \\ &= \sqrt{r^2 + S_2^2 + 2rS_2 \cos \vartheta_1} \end{aligned} \quad (\text{VII.16})$$

Die Differentiation nach dem Zweizentrenabstand ergibt

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial R} \left(\frac{1}{r_1} \right) &= - \frac{1}{r_1^2} \frac{\partial}{\partial R} r_1 = - \frac{1}{r_1^2} \frac{\partial}{\partial R} \sqrt{r^2 + S_1^2 - 2rS_1 \cos \vartheta_1} \\ &= - \frac{1}{r_1^2} \frac{\alpha_1^2 R - \alpha_1 r \cos \vartheta_1}{r_1} \end{aligned} \quad (\text{VII.17})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial R} \left(\frac{1}{r_2} \right) &= - \frac{1}{r_2^2} \frac{\partial}{\partial R} r_2 = - \frac{1}{r_2^2} \frac{\partial}{\partial R} \sqrt{r^2 + S_2^2 + 2rS_2 \cos \vartheta_1} \\ &= - \frac{1}{r_2^2} \frac{\alpha_2^2 R + \alpha_2 r \cos \vartheta_1}{r_2} \end{aligned} \quad (\text{VII.18})$$

Einsetzen dieser Beziehungen in Gleichung (15) führt zu

$$\frac{\partial V}{\partial R} = \frac{Z_1 e^2 (\alpha_1^2 R - \alpha_1 r \cos \vartheta_1)}{r^3} + \frac{Z_2 e^2 (\alpha_2^2 R + \alpha_2 r \cos \vartheta_1)}{r^3} \quad (VII.19)$$

Verwenden wir wieder die Gleichungen (9) und (10) als Anfangs- bzw. Endzustand, so erhalten wir für die radialen Matrixelemente

$$\begin{aligned} \langle \phi_{i\mu}(\vec{r}) | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_{i\mu}(\vec{r}) \rangle &= \frac{\delta_{\mu\bar{\mu}}}{(E_i - E_f)} \\ & * \sum_{\kappa, \bar{\kappa}} \left(\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \vartheta \, d\vartheta \, x_{\kappa}^{\mu+} x_{\bar{\kappa}}^{\bar{\mu}} \int_0^\infty r^2 dr F_{\mu\kappa}(r) \frac{\partial V}{\partial R} f_{\bar{\mu}\bar{\kappa}}(r) \right. \\ & \left. + \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \vartheta \, d\vartheta \, x_{\kappa}^{\mu+} x_{\bar{\kappa}}^{\bar{\mu}} \int_0^\infty r^2 dr G_{\mu\kappa}(r) \frac{\partial V}{\partial R} g_{\bar{\mu}\bar{\kappa}}(r) \right) . \end{aligned} \quad (VII.20)$$

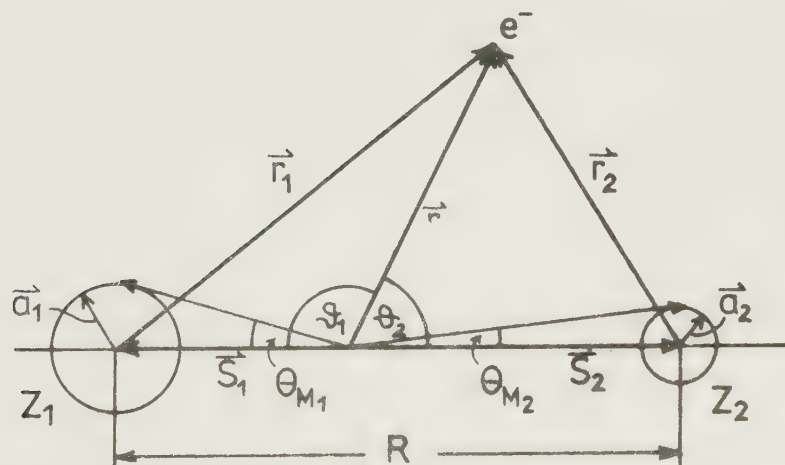
Sowohl die Winkelintegration als auch die radiale Integration wurden mit Hilfe eines 16 Punkte Gauss-⁷⁶integrationsverfahren gelöst. Die Zahlenwerte der radialen Matrixelemente sind nun auf fünf Stellen genau. Die Wellenstrukturen einiger Matrixelemente jenseits $R=2000fm$ sind verschwunden.

VII.1.b Die radialen Matrixelemente der Quasimoleküle für ausgedehnte Kerne

Schon bei der Lösung der ZweizentrenDiracgleichung haben wir für kleine Zweizentrenabstände $R \ll 150 \text{ fm}$ den massiven Einfluß der ausgedehnten Kerne auf die Energien festgestellt. Es ist zu erwarten, daß die radialen Matrixelemente bei kleinem R mit ausgedehntem Zweizentrenpotential sich stark von den Punktkernergebnissen unterscheiden.

Die radialen Matrixelemente für ausgedehnte Kerne berechnen wir wiederum ohne Entwicklung des Potentials nach Multipolen (Es werden dieselben Bezeichnungen wie bei den Punktkernen verwendet).

Bild 38:



Das Zweizentrenpotential für ausgedehnte Kerne lautet

$$V(\vec{r}) = - \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r}_1|} - \frac{Z_2 e^2}{|\vec{r}_2|} = \sum_{i=1}^2 V_i(r) \quad (\text{VII.21})$$

mit

$$|\vec{r}_i| = \begin{cases} |\vec{r}| & \text{für } |\vec{r}| \geq a_i \\ \frac{2a_i^3}{3a_i^2 - r^2} & \text{für } |\vec{r}| < a_i \end{cases} \quad i=1,2 \quad (\text{VII.22})$$

wobei a_i der Radius des i -ten Kerns ist.

Verwenden wir den Kosinussatz, so finden wir

$$r_1^2 = r^2 + S_1^2 - 2rS_1 \cos \vartheta_1 \quad (\text{VII.23})$$

$$r_2^2 = r^2 + S_2^2 + 2rS_2 \cos \vartheta_1 ,$$

außerdem gelten die Beziehungen (Bild 38)

$$|\vec{r}_1| = |\vec{r} - \vec{S}_1| , \quad |\vec{r}_2| = |\vec{r} - \vec{S}_2| . \quad (\text{VII.24})$$

Liegt $\vec{r}$ außerhalb des Torus mit den beiden Radien

$$r_a = \min(S_1 - a_1, S_2 - a_2) \quad (\text{VII.25})$$

$$r_b = \max(S_1 + a_1, S_2 + a_2),$$

dann ist das Zweizentrenpotential der ausgedehnten Kerne identisch mit dem Punktkernpotential. Liegt $\vec{r}$ jedoch innerhalb des Torus, so müssen wir zwei Fälle unterscheiden. Es gilt weiter das Punktkernpotential $V_i(r)$, wenn $\vec{r}$ außerhalb eines der beiden Kerne liegt.

Befindet sich $\vec{r}$ jedoch innerhalb eines oder beider Kerne (hierbei kommt es auf die Asymmetrie des Systems an), so ist das Potential ($i=1,2$)

$$V_i(\vec{r}) = - \frac{3Z_i e^2}{2a_i} + \frac{Z_i e^2}{2a_i^3} \cdot r_i^2 \quad (\text{VII.26})$$

Dies ist der Fall, wenn $\cos \vartheta_i \geq \cos \theta_{M_i}$ ist. θ_{M_i} ist der maximale Winkel zwischen den Vektoren $\vec{S}_i$ und dem Kernradius a_i (Bild 38). Verwenden wir nun wieder das Hellman-Feynman Theorem und differenzieren $V(r)$ nach dem Zweizentrenabstand, so gilt

$$\frac{\partial}{\partial R} V(\vec{r}) = \frac{\partial}{\partial R} (V_1(\vec{r}) + V_2(\vec{r})) = \sum_{i=1}^2 \frac{\partial}{\partial R} V_i(\vec{r}) \quad (\text{VII.27})$$

mit

$$V_i(\vec{r}) = \frac{-Z_i e^2}{|\vec{r} - \vec{S}_i|} \quad (\text{VII.28})$$

wenn $r < S_i - a_i$ oder $r > S_i + a_i$,
.....

$$V_i(\vec{r}) = - \frac{3Z_i e^2}{2a_i} + \frac{Z_i e^2}{2a_i^3} (\vec{r}^2 + \vec{S}_i^2 - 2\vec{r}\vec{S}_i \cos \vartheta_i)$$

wenn $S_i + a_i > r > S_i - a_i$ und $\cos \vartheta_i \geq \cos \theta_{M_i}$

und damit

$$\frac{\partial}{\partial R} V_i(\vec{r}) = \begin{cases} \frac{Z_i e^2 (\alpha_i^2 R - \alpha_i |\vec{r}| \cos \vartheta_i)}{r_i^3} & \text{wenn } r < S_i - a_i \\ & \text{oder } r > S_i + a_i \\ \frac{Z_i e^2 (\alpha_i^2 R - \alpha_i |\vec{r}| \cos \vartheta_i)}{a_i^3} & \text{wenn } S_i + a_i > r > S_i - a_i \\ & \text{und } \cos \vartheta_i \geq \cos \theta_{M_i} \end{cases} \quad (\text{VII.29})$$

Verwenden wir erneut die Gleichungen (9) und (10) als Anfangs- bzw. Endzustand, so erhalten wir für die radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne)

$$\begin{aligned} \langle \phi_{f\mu}(\vec{r}) | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_{i\bar{\mu}}(\vec{r}) \rangle &= \frac{\delta_{\mu\bar{\mu}}}{(E_i - E_f)} \sum_{i=1}^2 \sum_{\kappa, \bar{\kappa}} \left(\int_0^{2\pi} d\varphi \right. \\ &* \int_0^{\cos \theta_{M_i}} \chi_{\kappa}^{\mu+} \chi_{\bar{\kappa}}^{\mu} \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{\infty} r^2 dr F_{\mu\kappa}(r) \frac{\partial V_i}{\partial R} f_{\bar{\mu}\bar{\kappa}}(r) \\ &+ \left. \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{\cos \theta_{M_i}}^{\pi} \chi_{-\kappa}^{\mu+} \chi_{-\bar{\kappa}}^{\mu} \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{\infty} r^2 dr G_{\mu\kappa}(r) \frac{\partial V_i}{\partial R} g_{\bar{\mu}\bar{\kappa}}(r) \right), \end{aligned} \quad (\text{VII.30})$$

wobei

$$\cos \theta_{M_i} = \frac{r^2 + S_i^2 - a_i^2}{2rS_i}$$

gilt.

Damit genügend Stützpunkte des Gaußintegrationsverfahrens bei der Winkelintegration der radialen Matrixelemente innerhalb der beiden ausgedehnten Kerne liegen, haben wir ein 48 Punkte Gaußverfahren verwendet. Zur r-Integration genügt ein 16 Punkte Gaußverfahren.

Werden bei den radialen Matrixelementen die Anfangs- und Endzustände oder die Vorzeichen der magnetischen Quantenzahl vertauscht, so erhalten wir folgende Relationen ($\mu = |\mu|$)

$$\langle \phi_{f+\mu}(\vec{r}) | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_{i+\mu}(\vec{r}) \rangle = - \langle \phi_{i+\mu}(\vec{r}) | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_{f+\mu}(\vec{r}) \rangle \quad (\text{VII.31})$$

$$\langle \phi_{f+\mu}(\vec{r}) | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_{i+\mu}(\vec{r}) \rangle = + \langle \phi_{f-\mu}(\vec{r}) | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_{i-\mu}(\vec{r}) \rangle \quad .$$

Somit müssen wir nur eine Art der radialen Matrixelemente berechnen. Die anderen Kombinationen lassen sich aus den vorhergehenden Beziehungen herleiten.

VII.1.c Der Einfluß der Translationsfaktoren auf die radialen Matrixelemente

Bevor wir zur Diskussion der berechneten radialen Matrixelemente übergehen, wollen wir auf den Einfluß der Translationsfaktoren auf die radiale Kopplung zwischen den gebundenen Zuständen eingehen. Wir verwenden zur Beschreibung quasimolekularer Zustände eine molekulare Basis. Bei der Untersuchung der Dichteverteilung der Elektronen in symmetrischen und asymmetrischen Quasimolekülen (Kapitel V) haben wir bei den am stärksten gebundenen Zuständen ($1s\sigma$, $2p\frac{1}{2}\sigma$) festgestellt, daß diese molekularen Zustände in atomare Zustände der sich separierenden Atome übergehen ($R \gg 2000 \text{ fm}$). Die atomaren Wellenfunktionen werden durch die verwendete molekulare Basis unvollständig beschrieben. Die Wellenfunktionen müssen durch die Translationsfaktoren korrigiert werden. Je stärker der atomare Charakter der Wellenfunktion, desto größer wird der Einfluß der Translationsfaktoren. Die Korrektur der Wellenfunktionen bei größeren Zweizentrenabständen $R \gg 2000 \text{ fm}$ müssen wir auch bei den Kopplungsmatrixelementen berücksichtigen. Um konstante Besetzungsamplituden $a_n(t)$ (2) für R in dynamischen Rechnungen zu erhalten, ist es notwendig, daß die Kopplungsmatrixelemente asymptotisch verschwinden. Die $\partial/\partial R$ Matrixelemente, berechnet nach

Gleichung (20), haben jedoch einen konstanten Grenzwert, was zu unphysikalischen Oszillationen in der Amplitude bei großen Abständen führt⁷⁴. Dieses Verhalten wird hervorgerufen durch das Versagen der stationären Molekülzustände als asymptotische Lösungen der Streugleichung zweier Atome, die mit einer Geschwindigkeit $\vec{v}$ aneinander vorbeifliegen. Ist die Geschwindigkeit $\vec{v}$ konstant und parallel zur z-Achse (Verbindungsachse beider Kerne), dann brauchen wir nur jede separierte atomare Wellenfunktion mit dem Translationsfaktor $\exp(\pm \frac{1}{2} i m_e \vec{v} \cdot \vec{r})$ zu multiplizieren. Das Vorzeichen in dem Exponenten hängt davon ab, bei welchem Kern die atomare Wellenfunktion lokalisiert ist. Der Translationsfaktor ist nur eine Korrektur für große Zweizentrenabstände R. In dieser Region ist die "straight-line" Bahn eine gute Näherung und die beteiligten Elektronen sollten an einem der Kerne zentriert sein.

Zur Beschreibung symmetrischer Systeme haben wir zuerst Linearkombinationen zwischen geraden und den korrespondierenden ungeraden Molekülzustände zu bilden. Damit können wir die separierte Einteilchenatomwellenfunktion beschreiben⁵⁰:

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}_n^{(\pm)} &= \frac{1}{2}(\phi_n^{(+)} + \phi_n^{(-)}) e^{\pm \frac{i}{2} m \vec{v} \cdot \vec{r}} \pm \frac{1}{2}(\phi_n^{(+)} - \phi_n^{(-)}) e^{\mp \frac{i}{2} m \vec{v} \cdot \vec{r}} \quad (\text{VII.32}) \\ &= \begin{cases} \phi_n^{(+)} \cos(\frac{1}{2} m \vec{v} \cdot \vec{r}) + i \phi_n^{(-)} \sin(\frac{1}{2} m \vec{v} \cdot \vec{r}) \\ i \phi_n^{(+)} \sin(\frac{1}{2} m \vec{v} \cdot \vec{r}) + \phi_n^{(-)} \cos(\frac{1}{2} m \vec{v} \cdot \vec{r}) \end{cases} \end{aligned}$$

Wir verwenden die Translationsfaktoren nur in erster Ordnung der Projektilgeschwindigkeit .

Die korrigierten radialen Matrixelemente in der Dipolapproximation lauten⁷⁶

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\phi}_n^{(+)} | \frac{\partial}{\partial R} | \tilde{\phi}_m^{(+)} \rangle &= \langle \phi_n^{(+)} | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_m^{(+)} \rangle \quad (\text{VII.33}) \\ &- \frac{m}{2} (E_m^{(+)} - E_n^{(-)}) \langle \phi_n^{(-)} | z | \phi_m^{(+)} \rangle . \end{aligned}$$

Ist $\phi_n^{(+)} = |1s\sigma\rangle$, dann ist $\phi_n^{(-)} = |2p\frac{1}{2}\sigma\rangle$ usw. z ist die intrinsische Koordinate entlang der molekularen Achse. In Bild 39a,b haben wir für das U-U-System die Matrixelemente zwischen den $s\sigma$ -Zuständen nach Gl. (32) korrigiert.

Wir sehen, daß ab $R=2000\text{fm}$ die Translationseffekte zu wirken beginnen. Solange die Zweizentrenzustände ihren molekularen Charakter besitzen, sind die Korrekturen der Matrixelemente, hervorgerufen durch die Translationsmatrixelemente, zu vernachlässigen. Verschiedene Autoren^{77,78,79} versuchen mit einer Gewichtsfunktion $f(R, \vec{r})$ vor $\vec{v}$ dieses Verhalten zu simulieren. Neuste Rechnungen auf diesem

Gebiet von U. Heinz (Frankfurt)⁸⁰ zeigen, daß für das asymmetrische Pb-Cm-System die Korrekturen der Matrixelemente erst bei größeren Abständen $R \gg 3000 \text{ fm}$ anwachsen. Dies stimmt mit unseren Folgerungen aus der Elektronendichteverteilung (Kapitel V) überein.

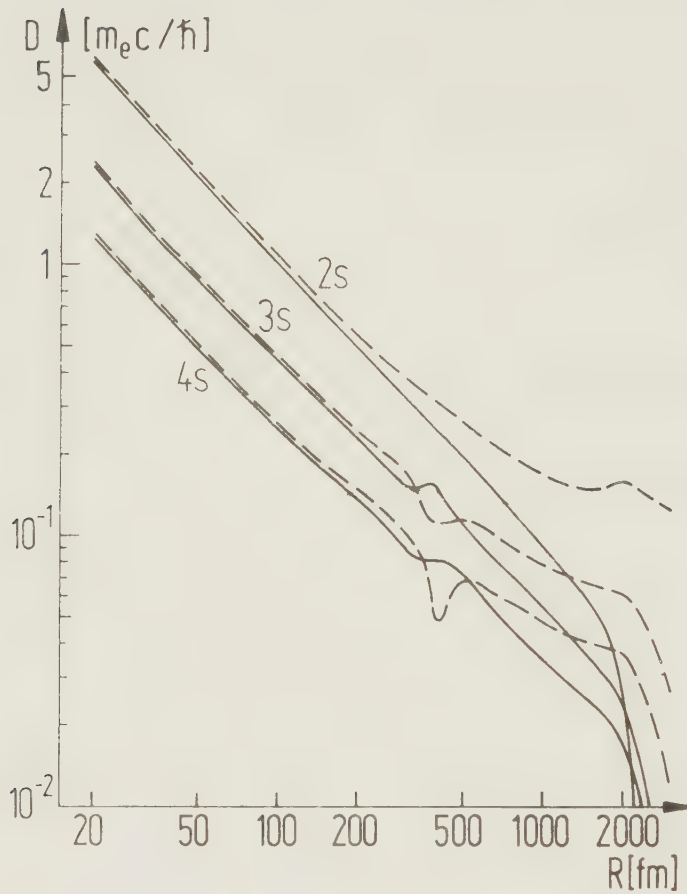


Bild 39a: Radiale Matrixelemente zwischen den $1s\sigma$, $2s\sigma$ ($2s$), $1s\sigma$, $3s\sigma$ ($3s$) und $1s\sigma$, $4s\sigma$ ($4s$) für das U-U Quasimolekül (gestrichelte Linien). Die durchgezogenen Linien geben die entsprechenden korrigierten radialen Matrixelemente berechnet in der Dipolnäherung (Gl.VII.33) wieder⁴⁵.

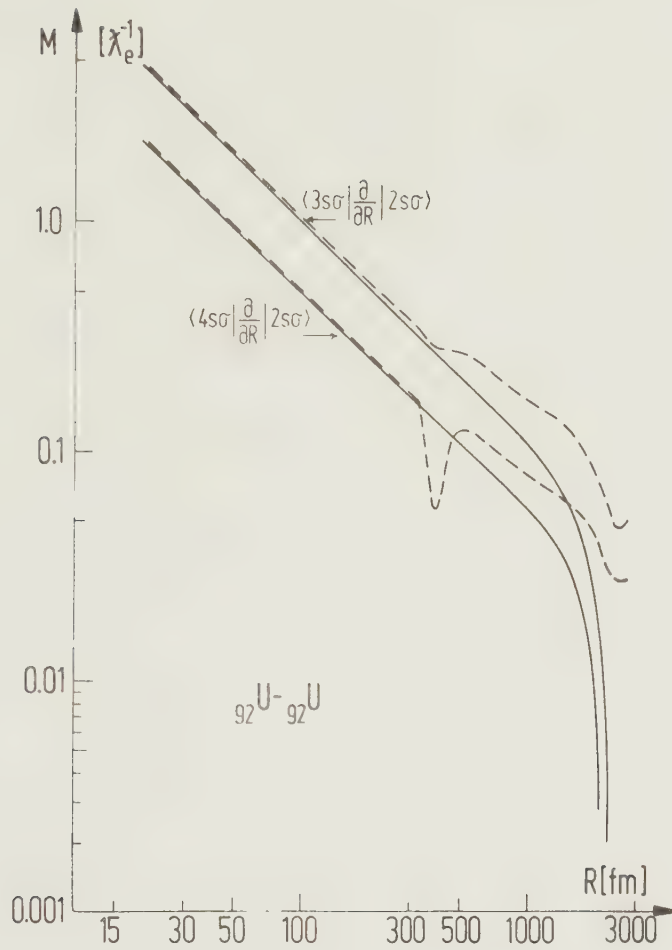


Bild 39b: Radiale Matrixelemente des $2s\sigma$ Zustandes mit
 den $3s\sigma$ und $4s\sigma$ Zuständen für das U-U-Quasi-
 molekül als Funktion des internuklearen Ab-
 standes. Die durchgezogenen Linien geben die
 entsprechenden Matrixelemente wieder, jedoch
 sind die Translationsfaktoren berücksichtigt.

VII.1.d Diskussion ausgewählter Ergebnisse

Die radialen Matrixelemente der im folgenden Abschnitt diskutierten Zweizentrensysteme wurden nach den Gleichungen (20) (Punktkerne) bzw. (30) (ausgedehnte Kerne) mit Hilfe eines 16 Punkte bzw. 48 Punkte Gauß-Integrationsverfahren⁷⁶ berechnet. Mit Ausnahme des Nb-Nb-Systeme (14 Zustände) haben wir für alle untersuchten Quasimoleküle jeweils 21 Zustände berechnet. Es handelt sich um folgende Energieniveaus: $1s_{\frac{1}{2}}^{\sigma}$, $2s_{\frac{1}{2}}^{\sigma}$, $2p_{\frac{1}{2}}^{\sigma}$, $2p_{\frac{3}{2}}^{\sigma}$, $2p_{\frac{3}{2}}^{\pi}$, $3s_{\frac{1}{2}}^{\sigma}$, $3p_{\frac{1}{2}}^{\sigma}$, $3p_{\frac{3}{2}}^{\sigma}$, $3p_{\frac{3}{2}}^{\pi}$, $3d_{\frac{3}{2}}^{\sigma}$, $3d_{\frac{3}{2}}^{\pi}$, $3d_{\frac{5}{2}}^{\sigma}$, $3d_{\frac{5}{2}}^{\pi}$, $4s_{\frac{1}{2}}^{\sigma}$, $4p_{\frac{1}{2}}^{\sigma}$, $4p_{\frac{3}{2}}^{\sigma}$, $4p_{\frac{3}{2}}^{\pi}$, $4d_{\frac{3}{2}}^{\sigma}$, $4d_{\frac{3}{2}}^{\pi}$, $4d_{\frac{5}{2}}^{\sigma}$, $4d_{\frac{5}{2}}^{\pi}$ (Notation nach den Zuständen des vereinigten Zweizentrensystems).

Die radiale Kopplung wirkt nur zwischen Zuständen gleicher magnetischer Quantenzahl. Die Zustände des Anfangs- und Endzustandes müssen verschieden sein. Da die Parität in symmetrischen Systemen eine "gute Quantenzahl" ist, haben wir unter Ausnutzung der Beziehungen (31) 52 radiale Matrixelemente in symmetrischen und 112 radialen Matrixelemente in asymmetrischen Zweizentrensystemen in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand berechnet. Alle anderen möglichen Matrixelemente sind Null (Auswahlregeln). Für das Pb-Cm-Quasimolekül haben wir die radialen Matrixelemente ausgewählt, deren Zahlenwerte größer als $10^{-2} [m_e c / \hbar]$ sind (Bild 40-68). Alle anderen Matrixelemente sind praktisch Null. Die $\frac{\partial}{\partial R}$ Matrixelemente des U-Cm Systems haben

die gleiche Struktur (in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand) wie im Pb-Cm System, deshalb sind in den Bildern 69-76 für das U-Cm Quasimolekül nur die wichtigsten radialen Kopplungen abgebildet. Die durch die Parität der Elektronenzustände erlaubten radialen Kopplungen des Pb-Pb-Quasimoleküls zeigen ebenfalls dieselbe Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand wie im Pb-Cm-System (Bild 77-79). Die nichtrelativistischen radialen Matrixelemente des Nb-Nb Systems sind in den Bilder 80-83 dargestellt. Ist einer oder sind beide Zustände eines Matrixelementes, bei einem bestimmten Abstand R, an einer verbotenen Niveaure Kreuzung beteiligt, so kommt es zu einer Wechselwirkung der Zustände, die sich in Form eines sehr starken Anstieges und anschließenden Abfalls des Matrixelementes im Kreuzungsbereich R bemerkbar macht und als Spitze in der Abbildung des Matrixelementes zu erkennen ist (Kapitel III.2). Bei fast allen Matrixelementen treten solche Spitzen auf, die die dynamischen Rechnungen der K-Schalenionisation, der molekularen Röntgenstrahlung der Anisotropie usw. sehr stark beeinflussen⁵⁴. Als Beispiel zeigen wir in Bild 39c die verbotene Kreuzung zwischen dem $2s\frac{1}{2}\nu$ - und $2p\frac{3}{2}\nu$ -Zustand bei $R \sim 420\text{fm}$ des Pb-Cm-Systems und die radiale Kopplung zwischen den beiden Zuständen. Vergleichen wir den maximalen Wert des $\langle 2p\frac{3}{2}\nu | \frac{\partial}{\partial R} | 2s\frac{1}{2}\nu \rangle$ Matrixelementes im Kreuzungsbereich mit den $1s\nu$ - $ns\nu$ Kopplungen ($R \rightarrow 0$), so stellen wir fest, daß beide Werte von derselben Größenordnung sind (Bild 39d).

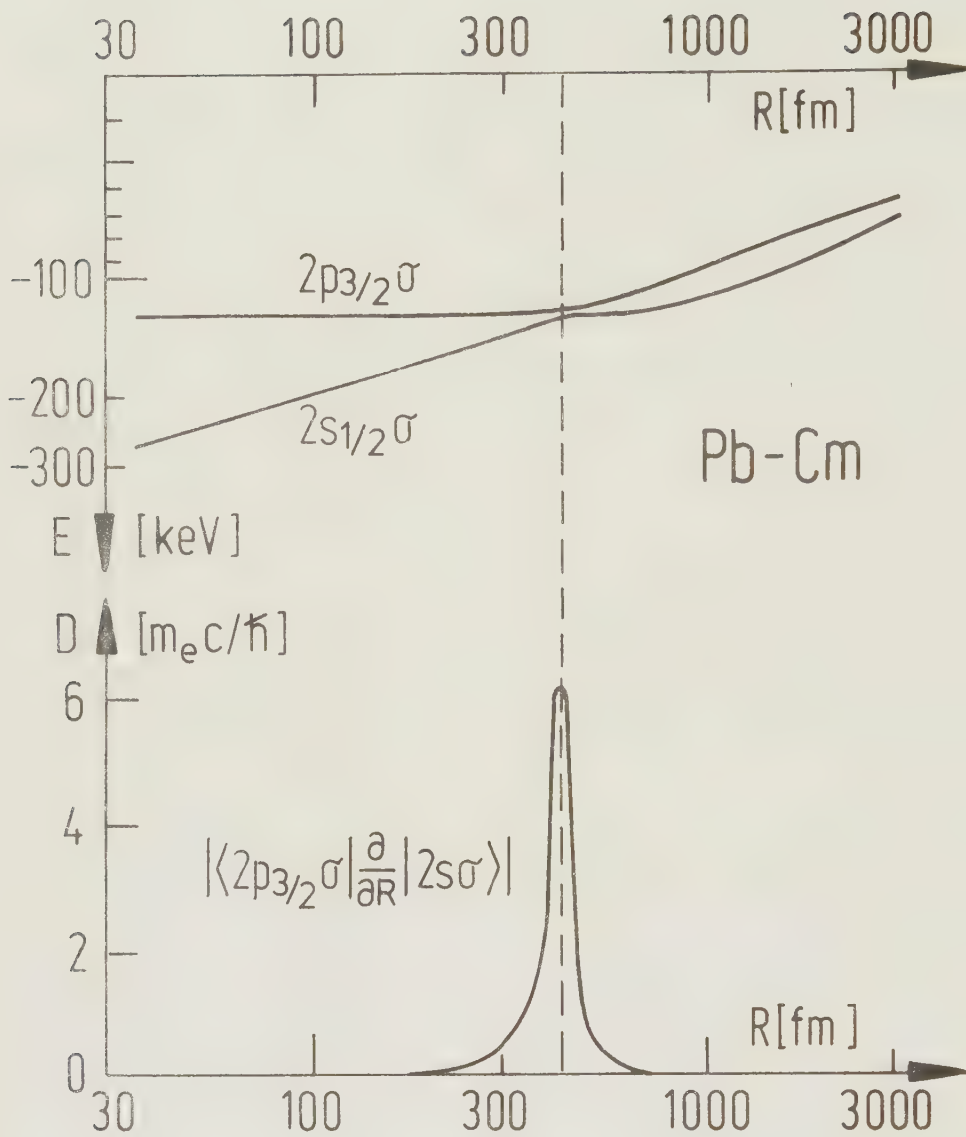


Bild 39 c: Ausschnitt aus dem Korrelationsdiagramm des Pb-Cm-Quasimoleküls. Die radiale Kopplung zwischen den beiden abgebildeten Zuständen ($2s\sigma$, $2p_{3/2}\sigma$) wurde im linearen Maßstab in Abhängigkeit des internuklearen Abstandes aufgetragen.

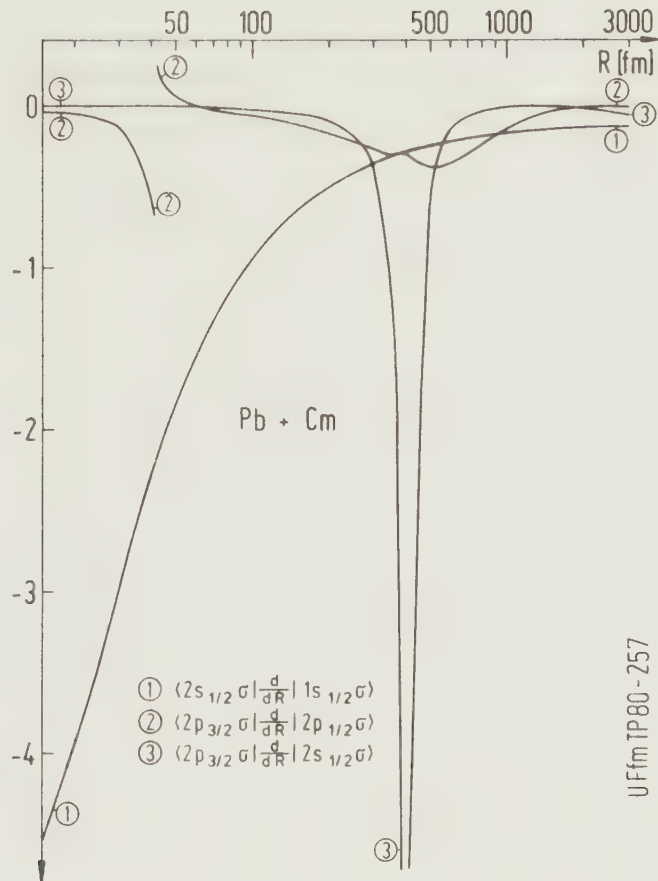


Bild 39d: Die radialen Matrixelemente des Pb-Cm-Quasimoleküls wurden in Abhängigkeit des internuklearen Abstandes in einer halblogarithmischen Darstellung abgebildet.

Um den Einfluß der ausgedehnten Kerne auf die Werte der radialen Matrixelemente zu zeigen, haben wir bei einigen Abbildungen auch die Punktkernlösungen eingezeichnet (Bild 40-44, 46, 47, 50, 51, 53, 58, 59, 62). Die Punktkernlösungen gehen bei $R \sim 15 \text{ fm}$ in die Lösungen für ausgedehnte Kerne über. In Tabelle 14 haben wir am Beispiel des Pb-Cm-Quasimoleküls die Differenz einiger radialer Matrixelemente zwischen Punktkern- und ausgedehnten Kernrechnungen aufgelistet ($R=16 \text{ fm}$ und $R=100 \text{ fm}$). Je größer $Z_{u.a.}$, desto stärker ist der Einfluß der Kernaussdehnung.

Die nichtrelativistischen radialen Matrixelemente des Nb-Nb-Quasimoleküls stimmen auch für kleine Abstände bei Punktkern- und ausgedehnten Kernrechnungen überein. Die radialen Matrixelemente (der Pb-Cm, U-Cm und Pb-Pb Quasimoleküle) zwischen den $ns\sigma$ -Zuständen $\langle n_f s\sigma | \frac{\partial}{\partial R} | n_i s\sigma \rangle$ haben dieselbe Größenordnung und denselben Verlauf, wenn die Differenz zwischen den Hauptquantenzahlen $n_f - n_i$ gleich sind (Beispiel: $2s\sigma - 1s\sigma$, $3s\sigma - 2s\sigma$, $4s\sigma - 3s\sigma$ oder $3s\sigma - 1s\sigma$, $4s\sigma - 2s\sigma$, siehe die Bilder 40-42, 69, 70, 72). Die bedeutenste Eigenart relativistischer radialer Matrixelemente zwischen den $ns\sigma$ -Zuständen ist der steile Anstieg ihrer Werte zu kleinen Abständen R hin^{10,39,45}.

Tabelle 14: Differenz der radialen Matrixelemente des Pb-Cm-Quasimoleküls berechnet für Punktkerne bzw. ausgedehnte Kerne. Die Prozentzahlen (100%) beziehen sich auf die Punktkernergebnisse.

R = 15 fm				R = 100 fm			
$\Delta \langle f \frac{\partial}{\partial R} i \rangle$				$\langle f \frac{\partial}{\partial R} i \rangle$			
$[m_e c / \hbar]$		%		$[m_e c / \hbar]$		%	
$\langle 2s_{\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial R} 1s_{\frac{1}{2}} \rangle$	3,22	44,89		0,07	6,93		
$\langle 3s_{\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial R} 1s_{\frac{1}{2}} \rangle$	1,32	45,15		0,03	6,84		
$\langle 4s_{\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial R} 1s_{\frac{1}{2}} \rangle$	0,71	44,77		0,02	6,79		
$\langle 3p_{\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial R} 2p_{\frac{1}{2}} \rangle$	2,53	41,30		0,10	9,34		
$\langle 4p_{\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial R} 2p_{\frac{1}{2}} \rangle$	1,18	41,36		0,05	9,32		

Im Gegensatz dazu zeigen die nichtrelativistischen $\frac{\partial}{\partial R}$ Matrixelemente des Nb-Nb Systems (Bilder 80,81) zwischen denselben $ns_{\frac{1}{2}}$ -Zuständen zu kleinen R-Werten einen fallenden Verlauf. Bei $R \sim 500$ fm haben diese Matrixelemente ein breites Maximum. Die maximalen Werte im Nb-Nb System sind um ca. 1,5 Größenordnungen kleiner als die entsprechenden Werte der relativistischen Quasimoleküle. Der Verlauf der radialen Matrixelemente in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand der symmetrischen und asymmetrischen Quasimoleküle zwischen den $ns_{\frac{1}{2}}$ -Zuständen wiederholt sich bei den $\frac{\partial}{\partial R}$

Kopplungen zwischen den $np\frac{1}{2}\epsilon$ Zuständen (Bilder 43, 44, 71, 73, 79). Das nichtrelativistische Matrixelement $\langle 3p\frac{1}{2}\epsilon / \frac{\partial}{\partial R} / 2p\frac{1}{2}\epsilon \rangle$ des Nb-Nb-Systems (Bild 82) fällt zu kleinen R-Werten hin ab. Gleichzeitig wechselt es zwischen $R \sim 500\text{fm}$ und $R \sim 2000\text{fm}$ sein Vorzeichen. Der Unterschied zwischen nichtrelativistischen und relativistischen $\frac{\partial}{\partial R}$ Matrixelementen beruht darauf, daß für Quasimoleküle $Z_1 + Z_2 > 137$ die $ns\epsilon$ und $np\frac{1}{2}\epsilon$ Zustände sehr sensitiv auf die Änderung des Zweizentrenabstandes reagieren und die Energieniveaus in superschweren Quasimolekülen sich besonders bei kleinen Abständen R sehr stark ändern (siehe Kapitel IV), während im selben Abstandsbereich die Energieniveaus des Nb-Nb Systems sich kaum verändern ("runway"). Betrachten wir als nächstes die Spitzen der Matrixelemente in den Bildern 40, 43 und 44, die eine Folge der verbotenen Niveaukreuzungen sind. Aus der Tabelle 9 können wir für das Pb-Cm-Quasimolekül entnehmen, daß sich folgende Zustände kreuzen: bei $R \sim 420\text{fm}$ der $2s\frac{1}{2}\epsilon \times 2p\frac{3}{2}\epsilon$, bei $R \sim 400\text{fm}$ der $3s\frac{1}{2}\epsilon \times 3d\frac{3}{2}\epsilon \times 3p\frac{1}{2}\epsilon$, bei $R \sim 400\text{fm}$ der $4s\frac{1}{2}\epsilon \times 4d\frac{3}{2}\epsilon \times 4p\frac{1}{2}\epsilon$. Bei diesen Abständen beobachten wir die Spitzen der Matrixelemente (Bild 40). Verbotene Kreuzungen, an denen $np\frac{1}{2}\epsilon$ Zustände beteiligt sind, gibt es bei den Zweizentrenabständen $R \sim 32, 43, 63, 400, 2400, 2950\text{ fm}$ (Tabelle 9). An diesen Stellen befinden

sich mehr oder weniger stark ausgeprägte Spitzen der Matrixelemente (Bild 43,44). Der Unterschied der $\frac{\partial}{\partial R}$ Matrixelemente zwischen Punktkern und ausgedehnten Kernlösungen wird zu kleinen Abständen R hin immer größer (Tabelle 14, Bilder 40 - 44). Die $\frac{\partial}{\partial R}$ Kopplungen zwischen den $p_{\frac{3}{2}}$ Zuständen (Bilder 41, 44, 70, 73, 83) ist im Vergleich zu den vorher besprochenen Kopplungen sehr klein. Die Beträge der Matrixelemente unterhalb $10^{-1} [m_e c / \hbar]$. Diese Feststellung gilt auch für die Matrixelemente zwischen den $p_{\frac{3}{2}}^{\pi}$ Zuständen (Bilder 54, 79, 83). Die Peaks der Matrixelemente werden durch die verbotenen Niveaure Kreuzungen verursacht.

Die $\frac{\partial}{\partial R}$ Kopplungen asymmetrischer Quasimoleküle zwischen den $1s^{\pi}$ und den $p_{\frac{1}{2}}^{\pi}$, $p_{\frac{3}{2}}^{\pi}$, $d_{\frac{3}{2}}^{\pi}$, $d_{\frac{5}{2}}^{\pi}$ Zuständen sind für kleine Zweizentrenabstände R zu vernachlässigen (Bilder 45 - 48, 74). Die Zunahme des Abstandes R führt zu einem Anwachsen der radialen Matrixelemente um 1 - 2 Dekaden. Die Peaks der Matrixelemente für Punktkerne sind teilweise von den Peaks der Matrixelemente für ausgedehnte Kerne verschoben. Die verbotenen Kreuzungen sind in den Korrelationsdiagrammen um denselben Betragsabstand ΔR verschoben. In symmetrischen Quasimolekülen tauchen diese Kopplungen nicht auf, da die Parität eine "gute" Quantenzahl ist.

Bei den $\frac{\partial}{\partial R}$ Kopplungen asymmetrischer Systeme zwischen höheren ns Zuständen ($n > 1$) und den $p_{\frac{1}{2}}$, $d_{\frac{3}{2}}$, $d_{\frac{5}{2}}$ Zuständen beobachten wir eine analoge Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand R (Bilder 47-51, 57-60, 63, 65, 68).

Eine Ausnahme bilden die $\frac{\partial}{\partial R}$ Matrixelemente zwischen den $ns_{\frac{1}{2}}$ und $np_{\frac{3}{2}}$ Zuständen ($n > 1$) und den $ms_{\frac{1}{2}}$ und $md_{\frac{3}{2}}$, $md_{\frac{5}{2}}$ Zuständen ($m > 2$). Die Zustände der Matrixelemente kreuzen miteinander. Deshalb kommt es zu ausgeprägten Spitzen der Matrixelemente innerhalb des Kreuzungsbereiches (Bilder 50, 58-60, 62, 68, 75). Die radialen Matrixelemente $\langle np_{\frac{3}{2}} | \frac{\partial}{\partial R} | ns_{\frac{1}{2}} \rangle$ existieren in symmetrischen Quasimolekülen nicht.

In der Diskussion der verbotenen Niveaure Kreuzungen asymmetrischer Systeme haben wir auf zwei dreifach-Kreuzungen bei $R \sim 400 \text{ fm}$ hingewiesen ($3s \times 3p_{\frac{1}{2}} \times 3d_{\frac{3}{2}}$ und $4s \times 4p_{\frac{1}{2}} \times 4d_{\frac{3}{2}}$, Bilder 12b, c; 14b,c; 15b,c; 16b,c; 17b,c). Diese Kreuzungen verursachen bei allen Matrixelementen, an denen diese Zustände beteiligt sind, innerhalb eines Abstandsbereiches R von ca. 300 fm einen starken Anstieg der Werte von 2 bis 3 Dekaden (Bilder 42-45, 47, 49, 51, 53, 57-65). Diese Dreierkreuzungen treten bei symmetrischen Systemen nicht auf.

Der Verlauf und die maximale Größe dieser Peaks sind bei den dynamischen Rechnungen (K-Schalenionisation usw.) sehr wichtig.

Alle radialen Matrixelemente zwischen den verschiedenen $p_{\frac{1}{2}}^{\epsilon}$ und $np_{\frac{3}{2}}^{\epsilon}$ Zuständen zeigen alle dieselbe Struktur in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand R (Bilder 42, 43, 52, 61, 71, 72, 76, 79). Zwischen den kleinen Abständen $R \sim 20 \text{ fm}$ und $R \sim 60 \text{ fm}$ haben die Matrixelemente eine Spitze, die eine Folge der verbotenen Niveaure Kreuzungen ist.

Nach einem Abfall der Werte um 2 - 3 Dekaden ($R \sim 50 - 100 \text{ fm}$), steigen die Matrixelemente erneut um 1-2 Dekaden an und erreichen bei $R \sim 150 \text{ fm}$ ihren maximalen Wert, bevor sie zu größeren R -Werten wieder abfallen. Da bei kleinen Abständen die $p_{\frac{1}{2}}^{\epsilon}$ und $p_{\frac{3}{2}}^{\epsilon}$ Zustände des Nb-Nb-Systems an keiner verbotenen Kreuzung teilnehmen, erscheinen auch keine Peaks in den Matrixelementen. Die $\frac{\partial}{\partial R}$ -Werte steigen mit zunehmendem Abstand an und erreichen bei $R \sim 90 \text{ fm}$ ihren maximalen Wert, bevor sie um 3-4 Dekaden wieder abfallen (Bild 82).

Die $\frac{\partial}{\partial R}$ Kopplung symmetrischer und asymmetrischer Quasimoleküle zwischen den $d_{\frac{3}{2}}^{\epsilon}$, $d_{\frac{5}{2}}^{\epsilon}$ und $d_{\frac{3}{2}}^{\pi}$, $d_{\frac{5}{2}}^{\pi}$ Zuständen sind für kleine Zweizentrenabstände zu vernachlässigen (Bilder 66-68). Die Zunahme des internuklearen Abstandes

führt zu einem Anwachsen der radialen Matrixelemente um 2-3 Dekaden. Zwischen $R \sim 1000 \text{ fm}$ und $R \sim 2000 \text{ fm}$ haben die $\frac{\partial}{\partial R}$ Kopplungen zwischen den d-Zuständen ein breites Maximum. Die Spitzen in den Matrixelemente sind eine Folge der verbotenen Kreuzungen der d-Zustände,

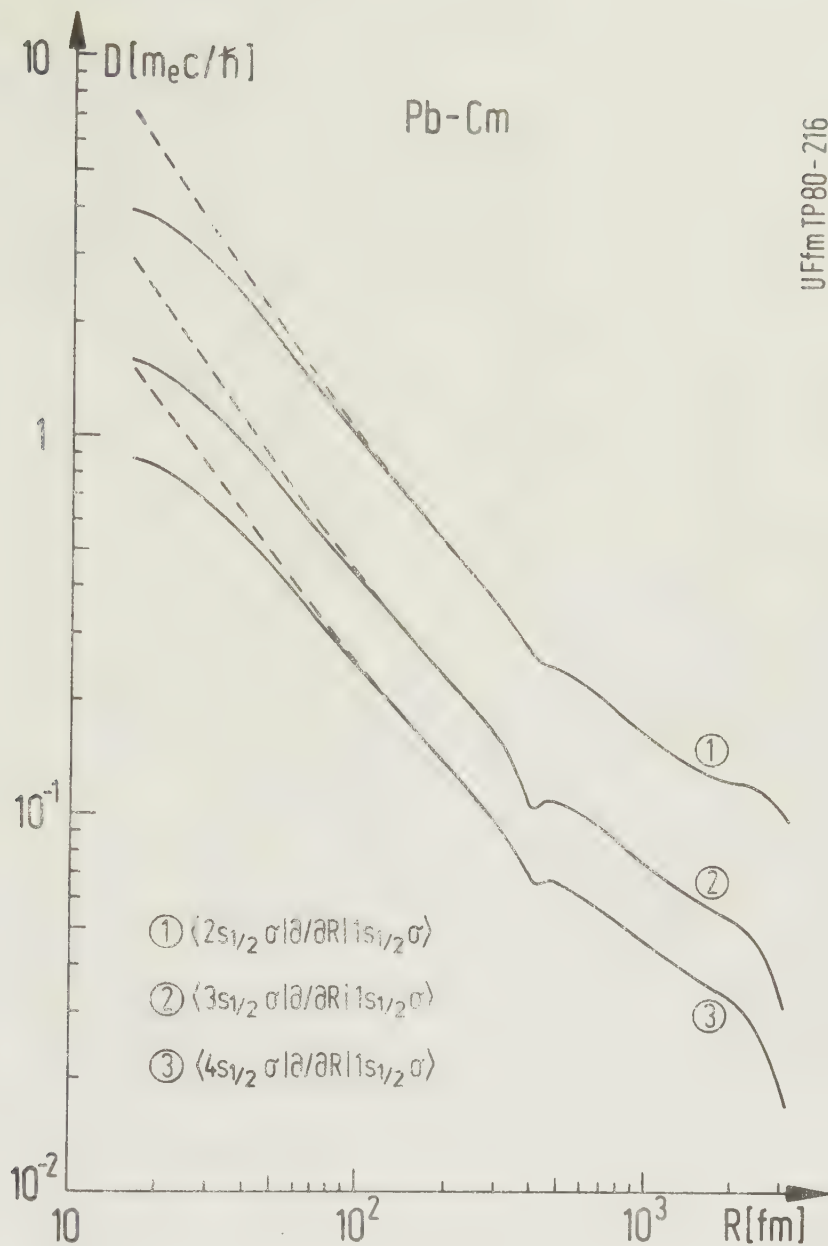


Bild 4o: Der Betrag der radialen Matrixelemente des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

Durchgezogene Linien: ausgedehnte Kerne

Gestrichelte Linien: Punktkerne

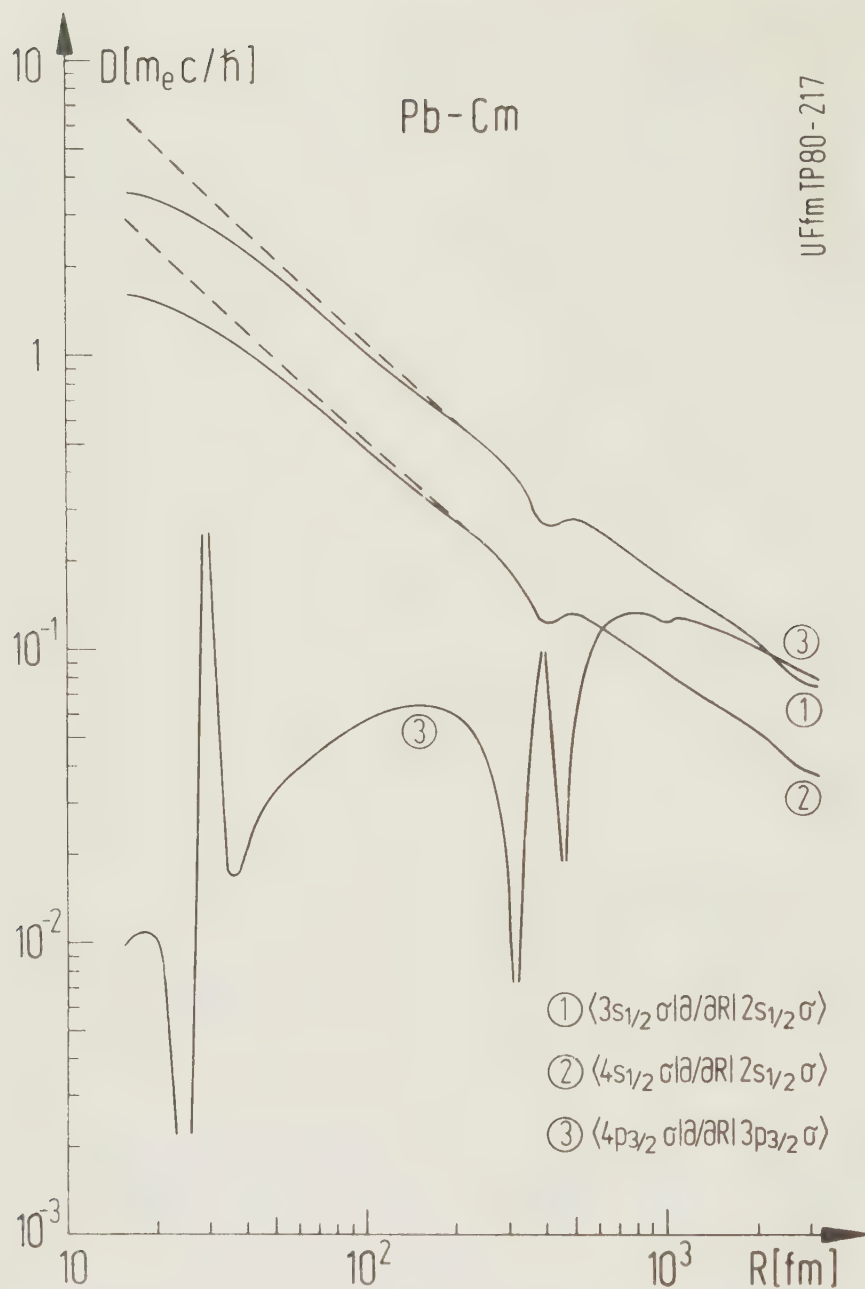


Bild 41: Der Betrag der radialen Matrixelemente des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

Durchgezogene Linien: ausgedehnte Kerne

Gestrichelte Linien: Punktkerne

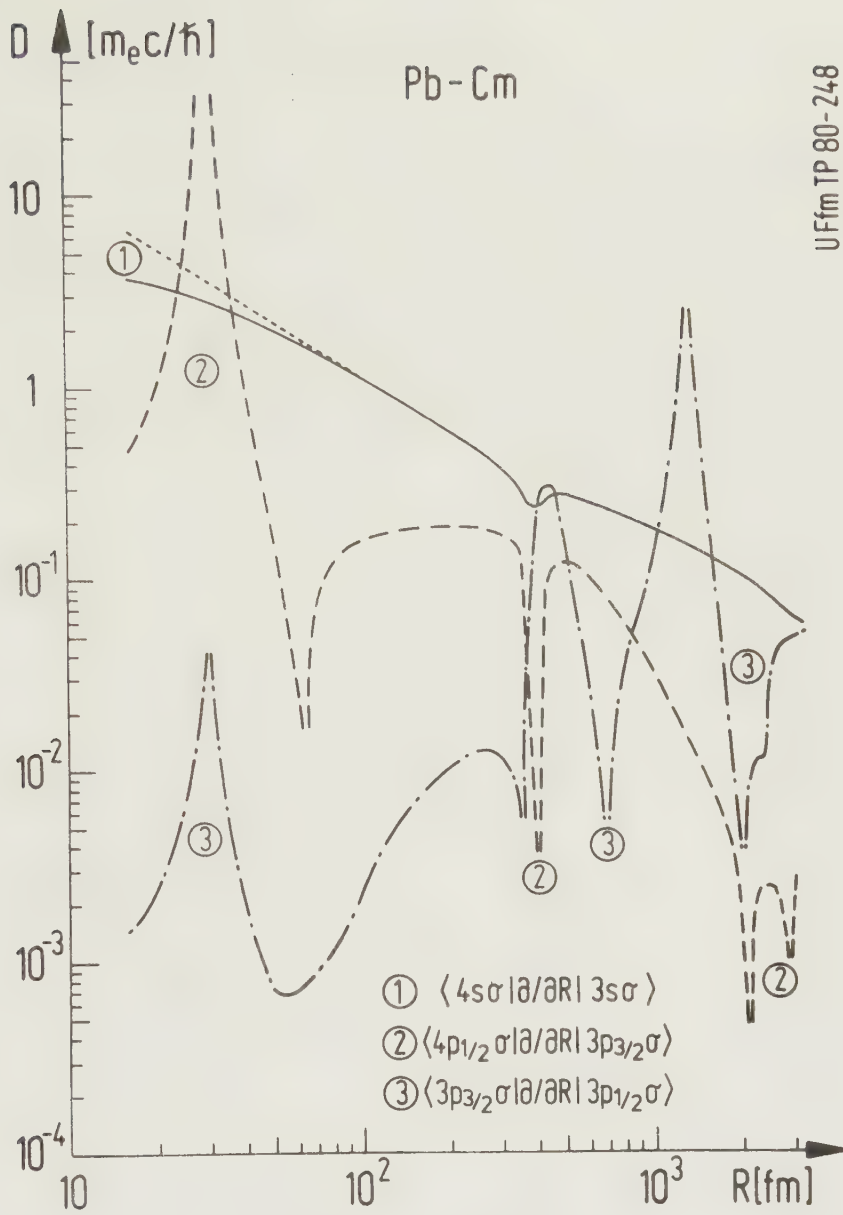


Bild 42: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

Gepunktete Linie: Punktkerne

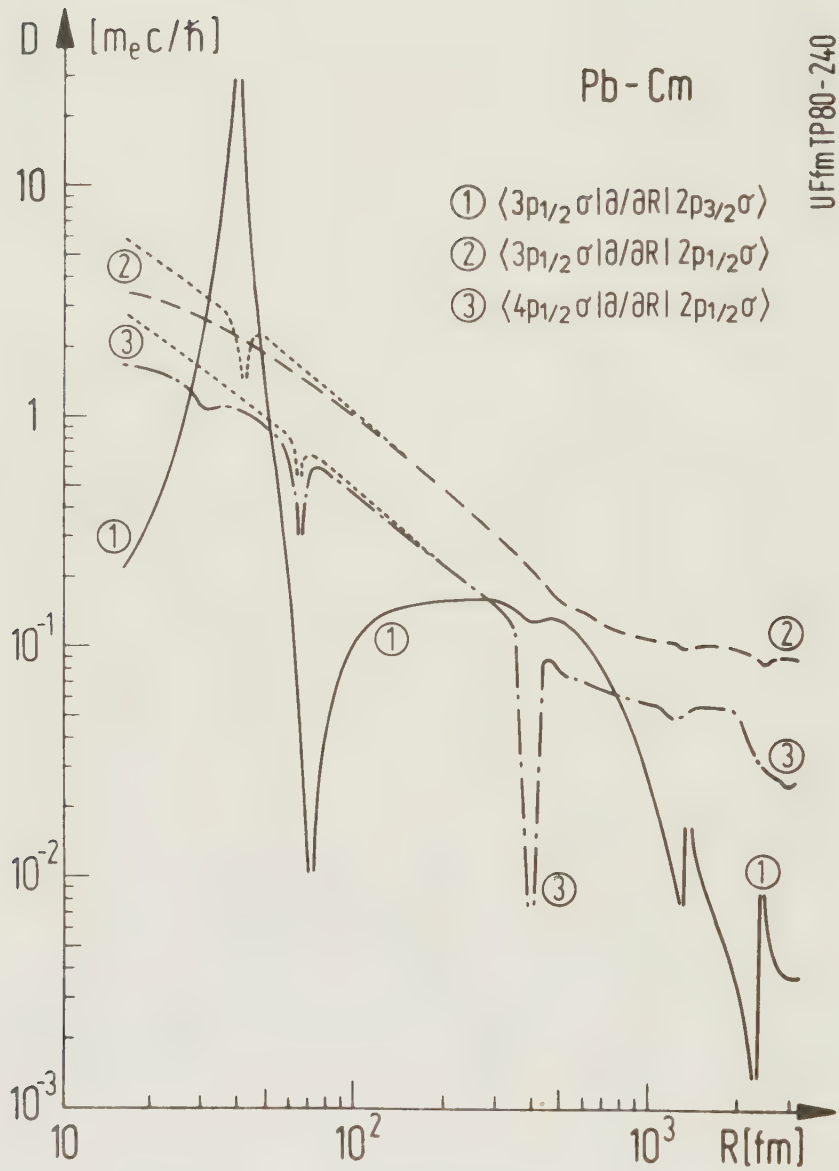


Bild 43: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausge-
 dehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängig-
 keit vom internuklearen Abstand.
 Gepunktete Linie: Punktkerne

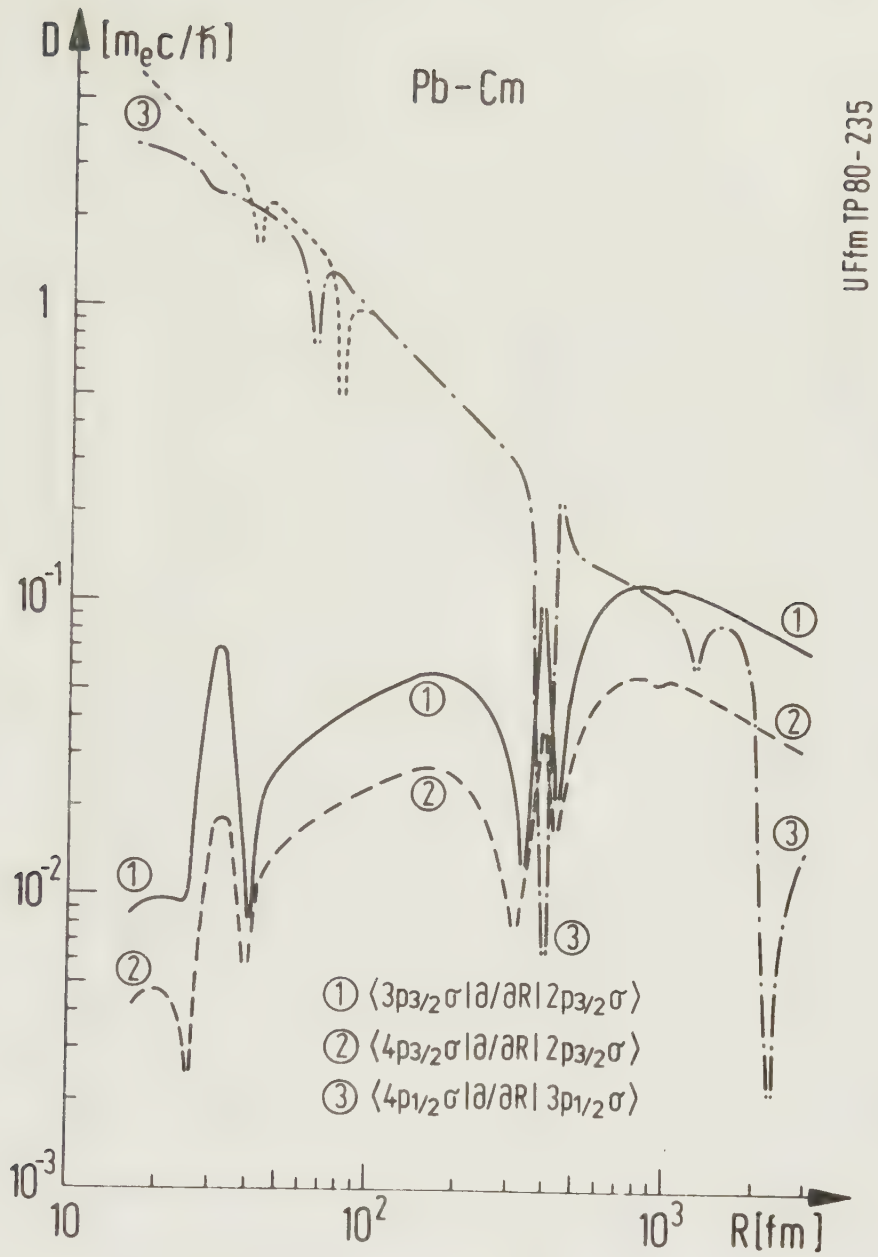


Bild 44: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

Gepunktete Linie: Punktkerne

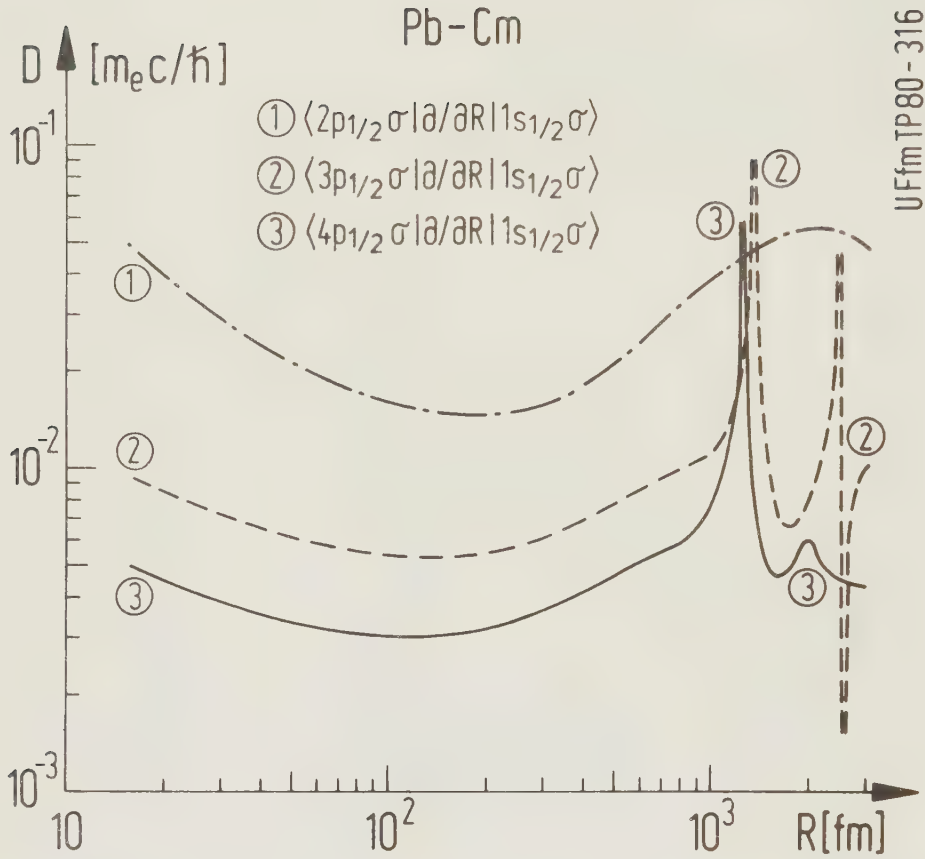


Bild 45: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküles in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

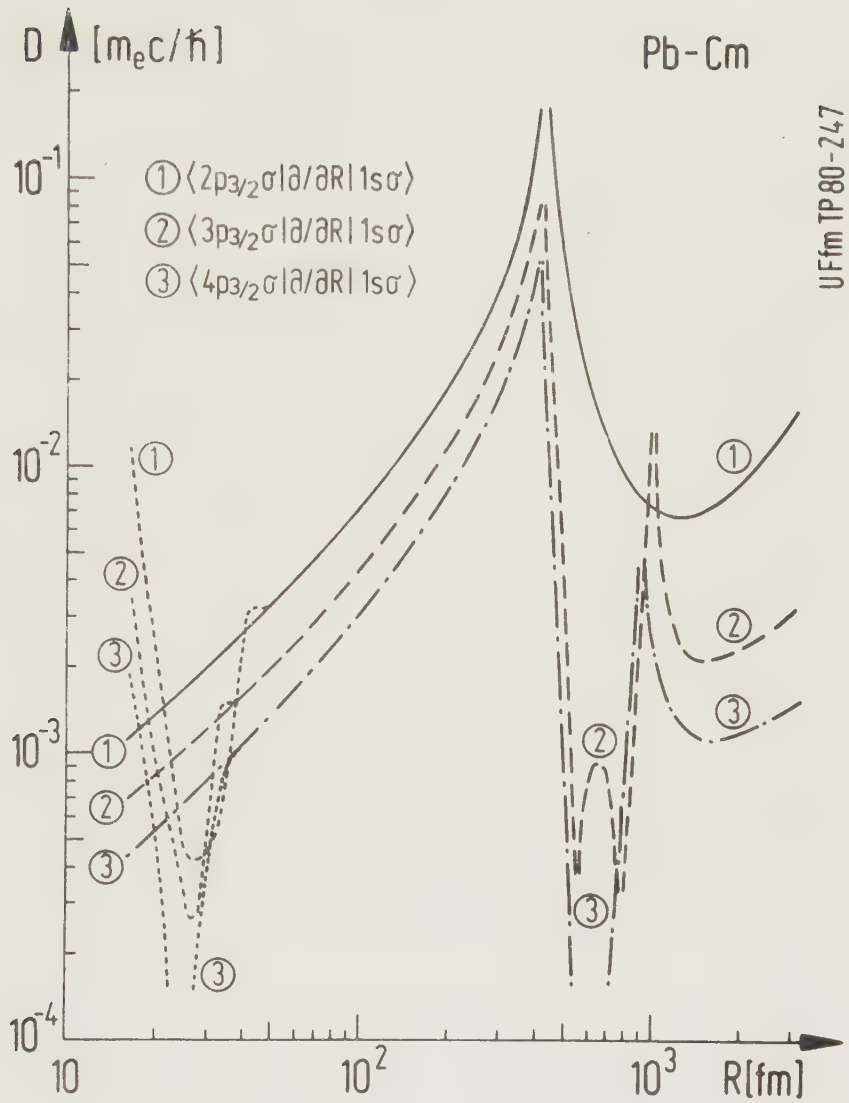


Bild 46: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.
 Gepunktete Linie: Punktkerne

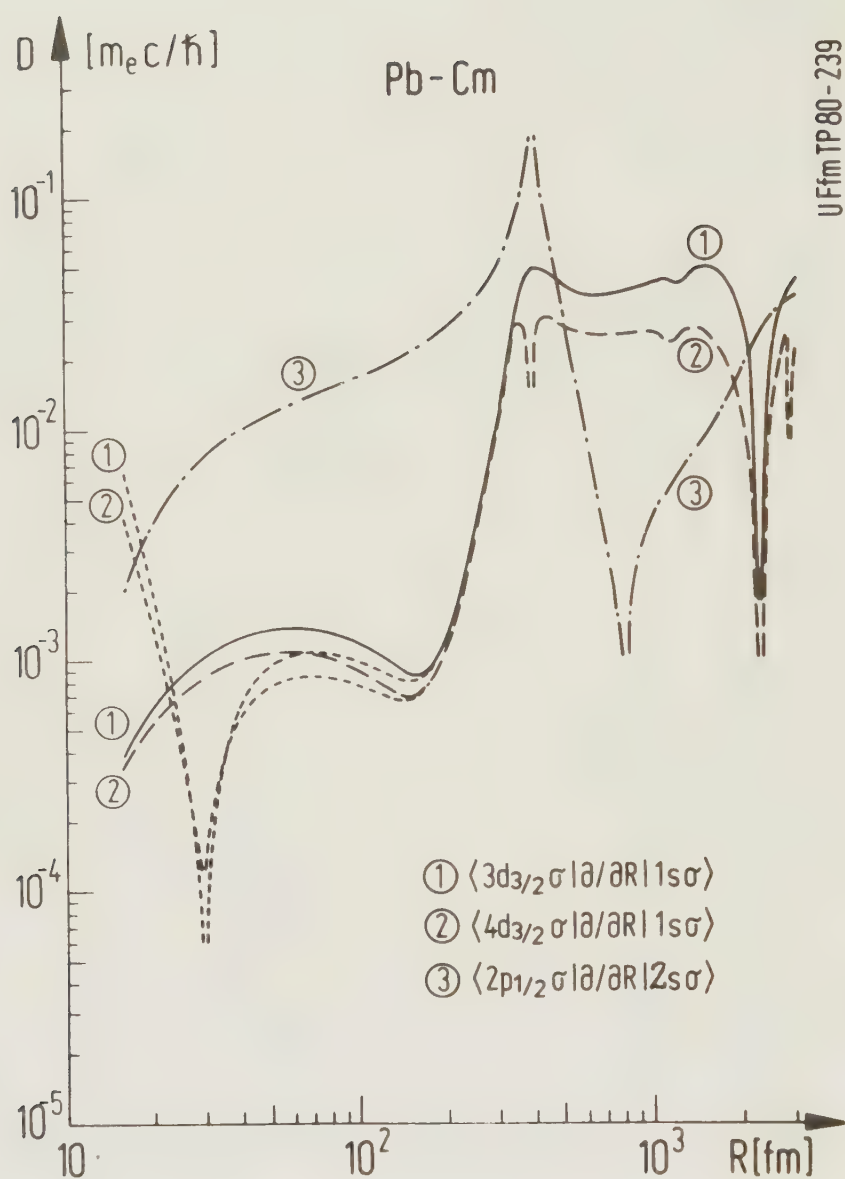


Bild 47: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

Gepunktete Linie: Punktkerne

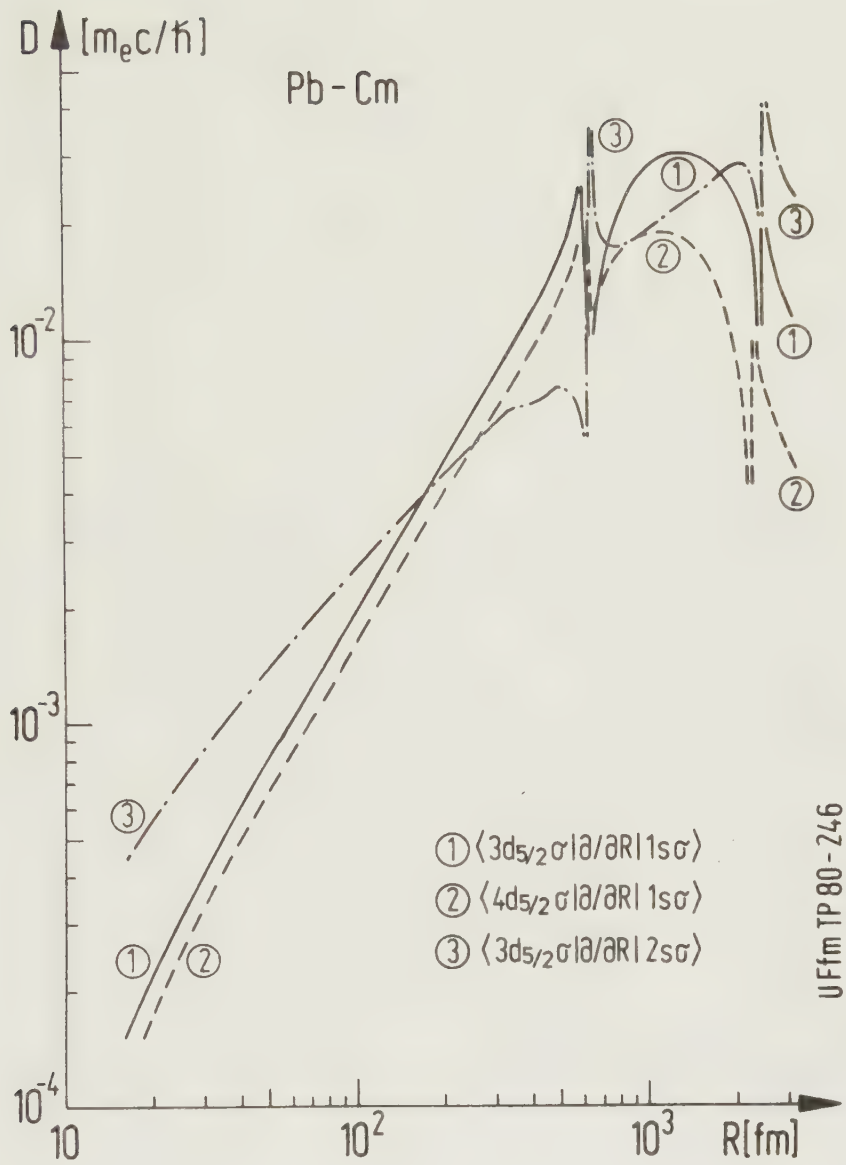


Bild 48: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

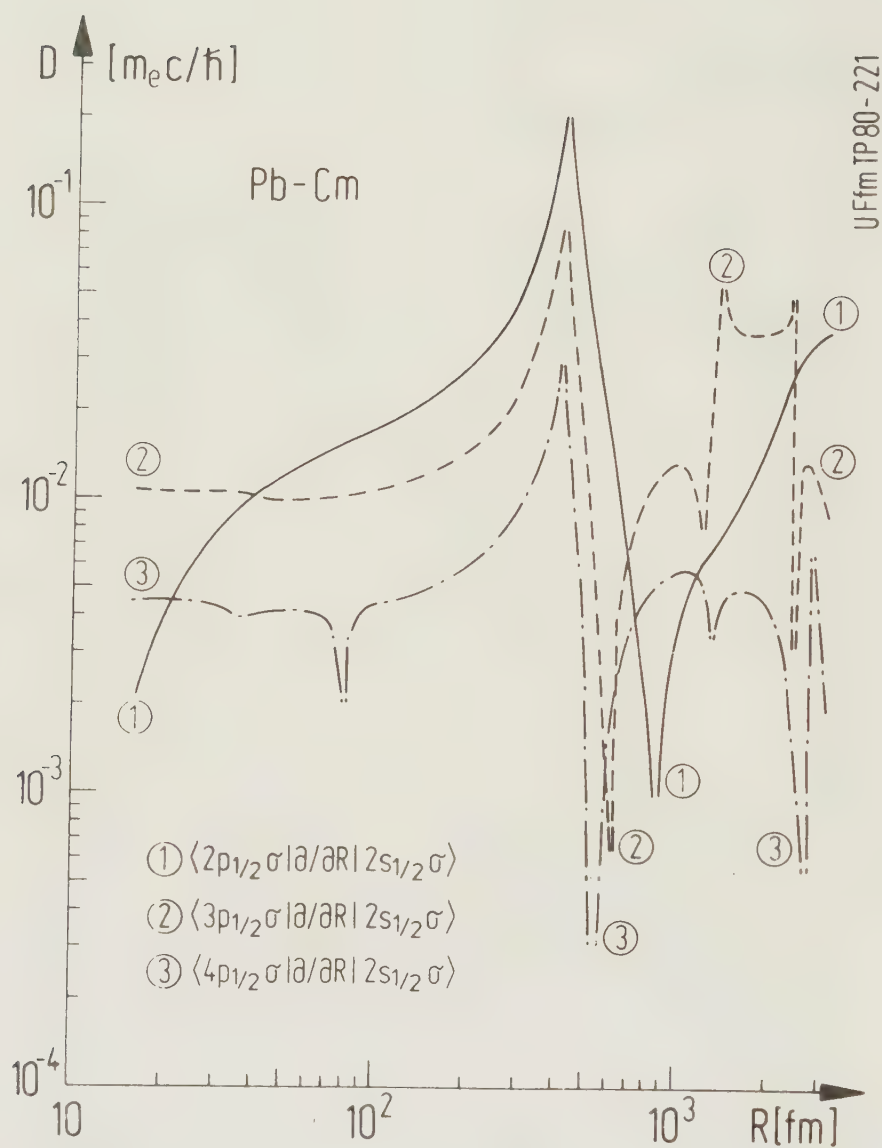


Bild 49: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

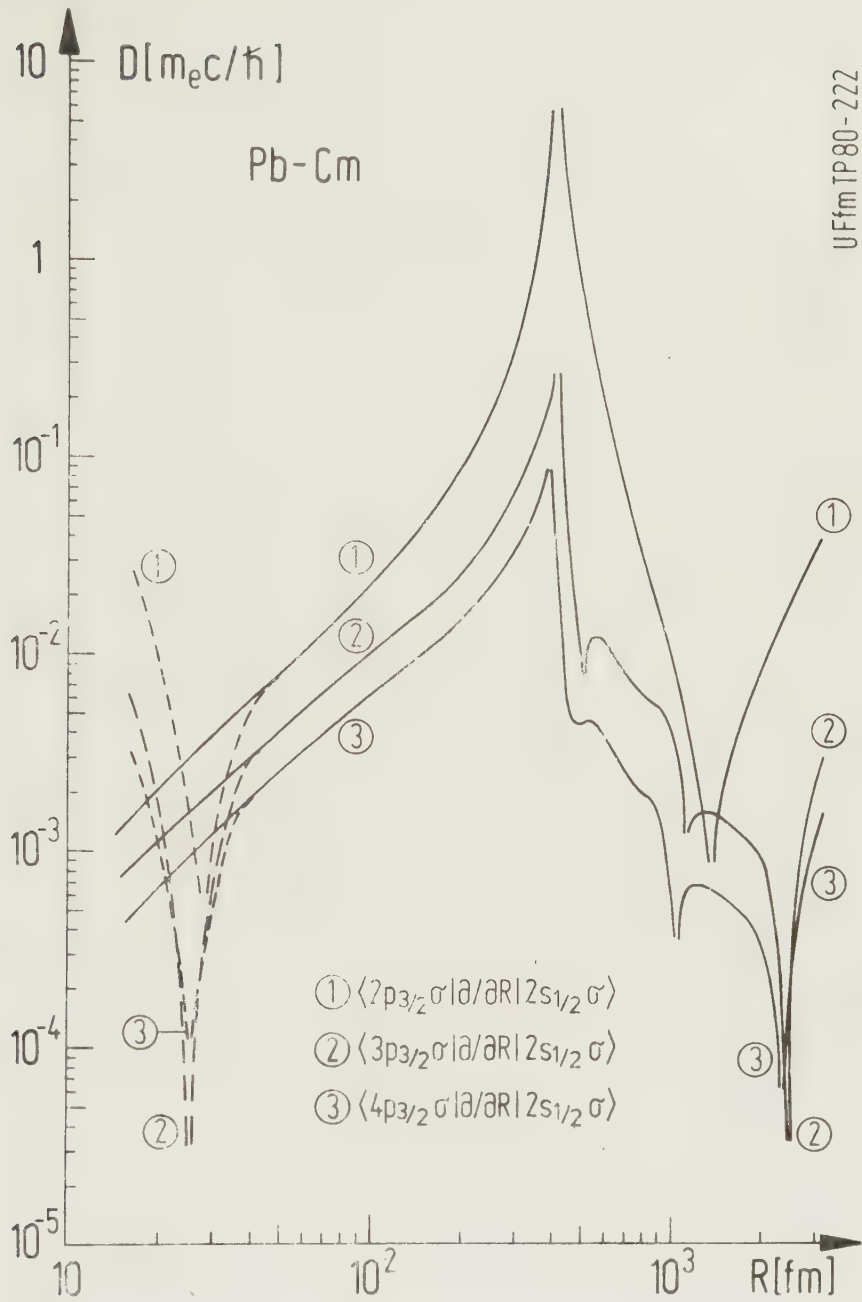


Bild 50: Der Betrag der radialen Matrixelemente des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

Durchgezogene Linien: ausgedehnte Kerne

Gestrichelte Linien: Punktkerne

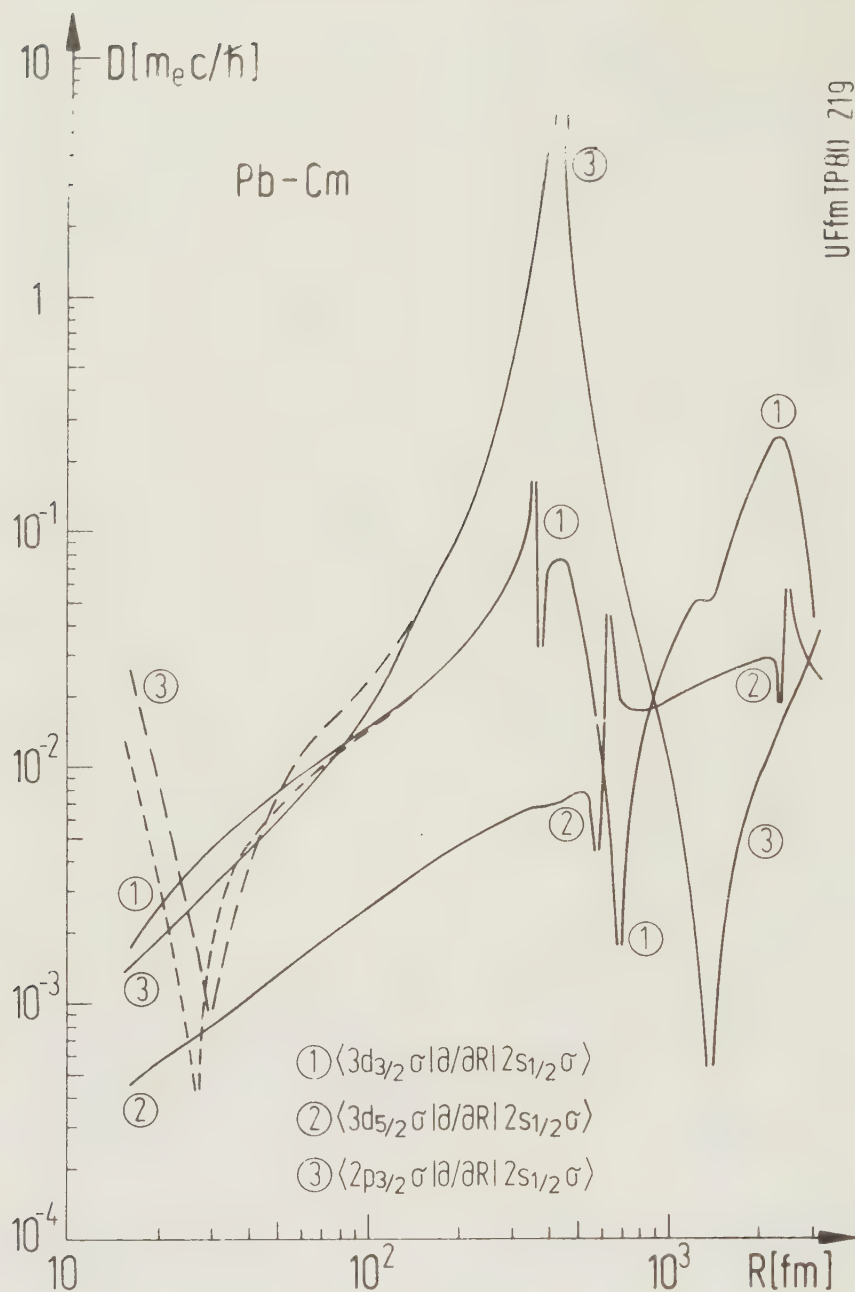


Bild 51: Der Betrag der radialen Matrixelemente des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

Durchgezogene Linien: ausgedehnte Kerne

Gestrichelte Linien: Punktkerne

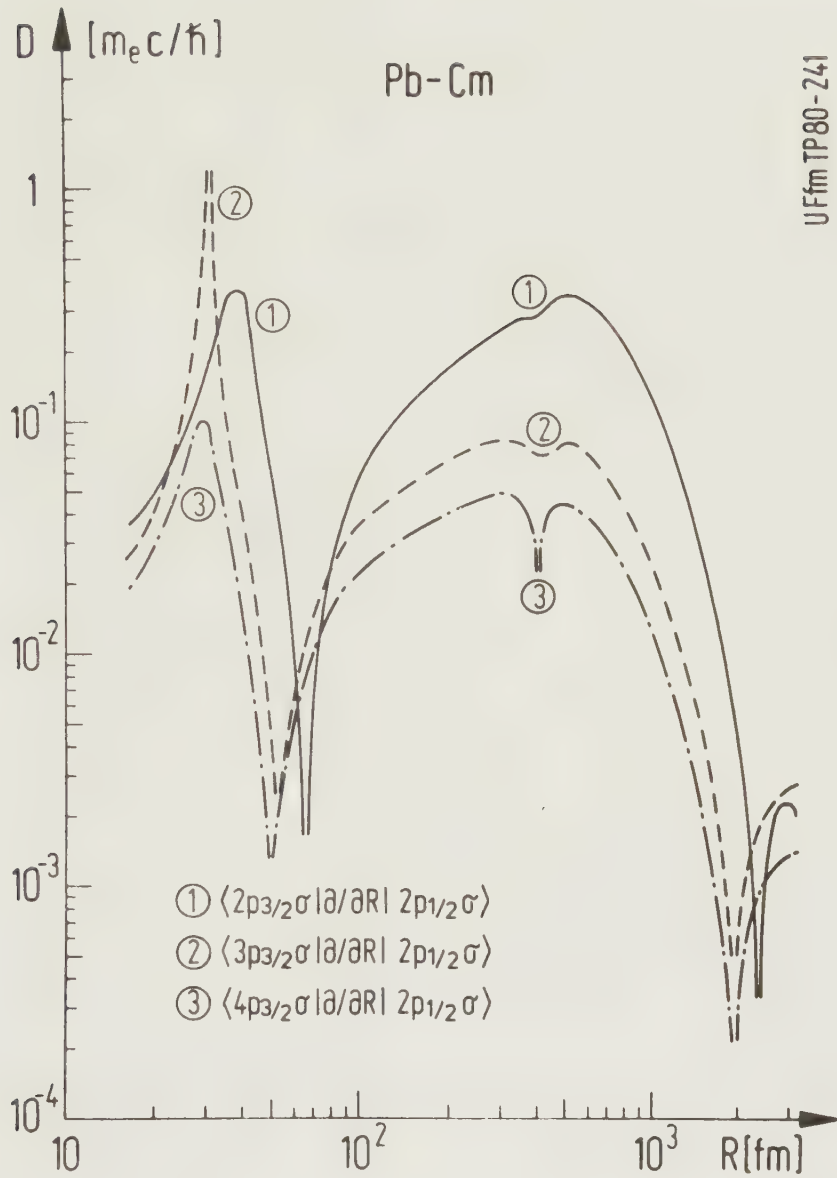


Bild 52: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

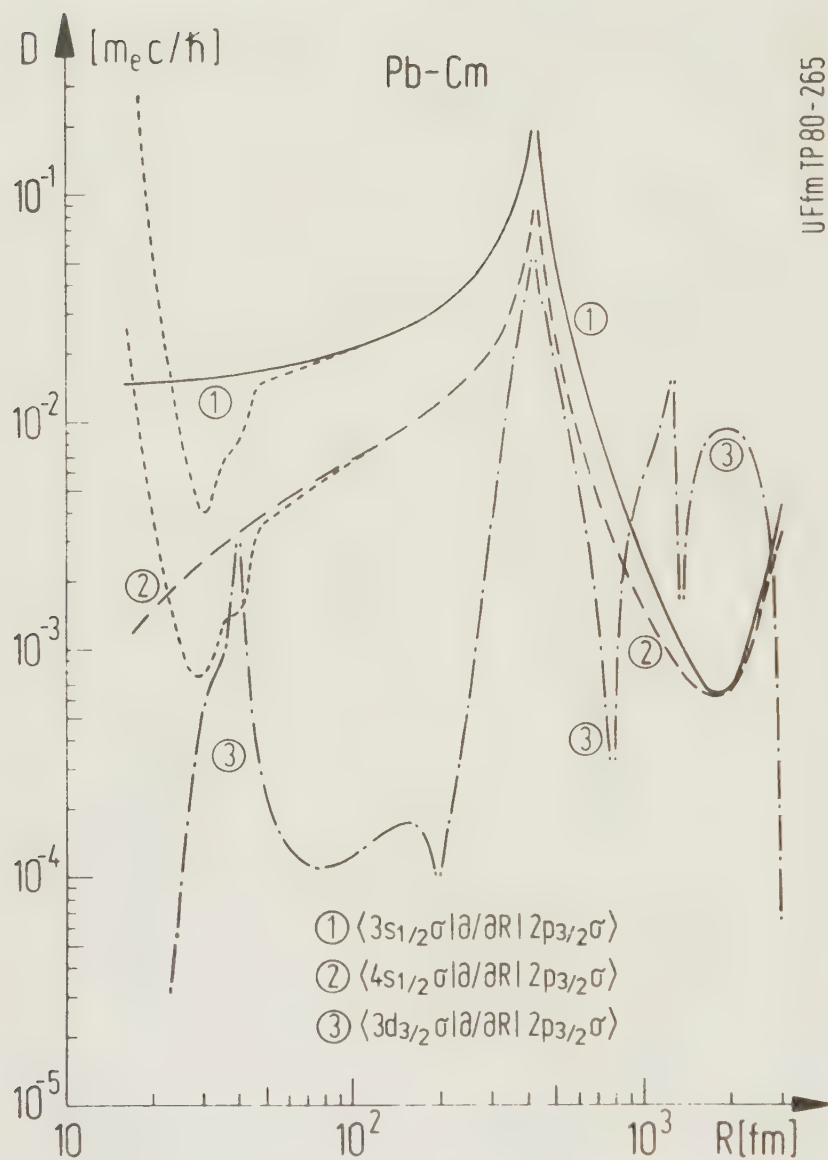


Bild 53: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

Gepunktete Linie: Punktkerne

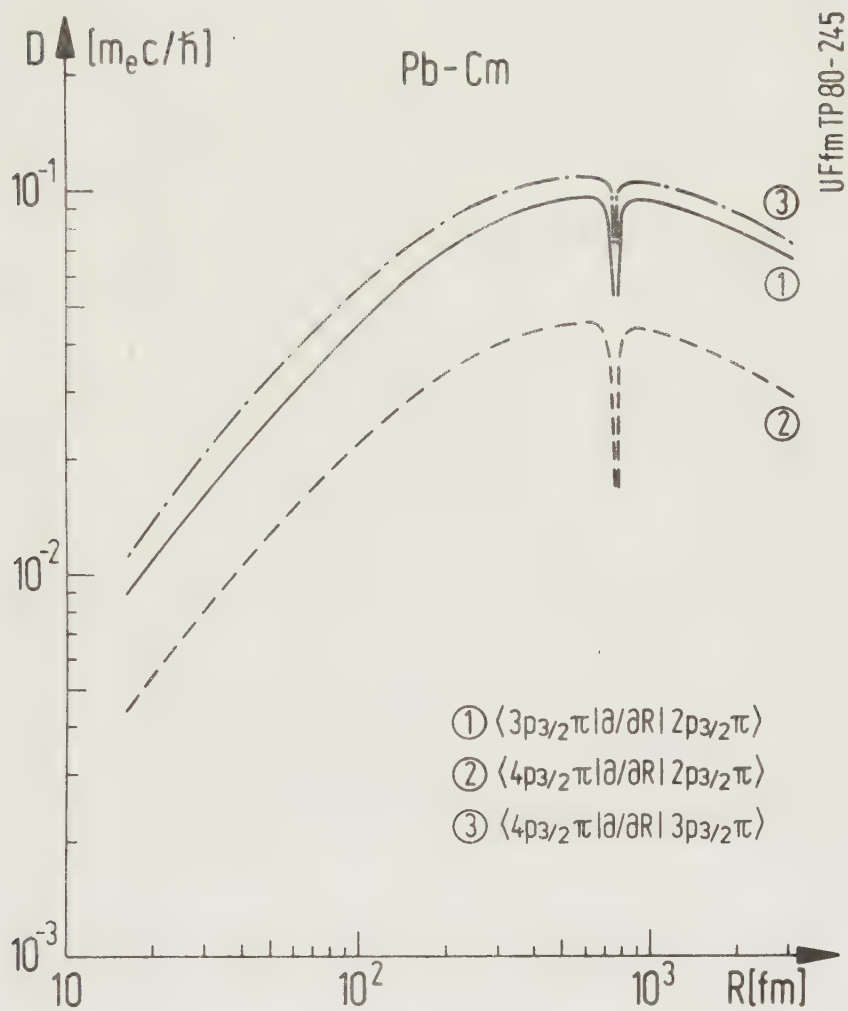


Bild 54: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

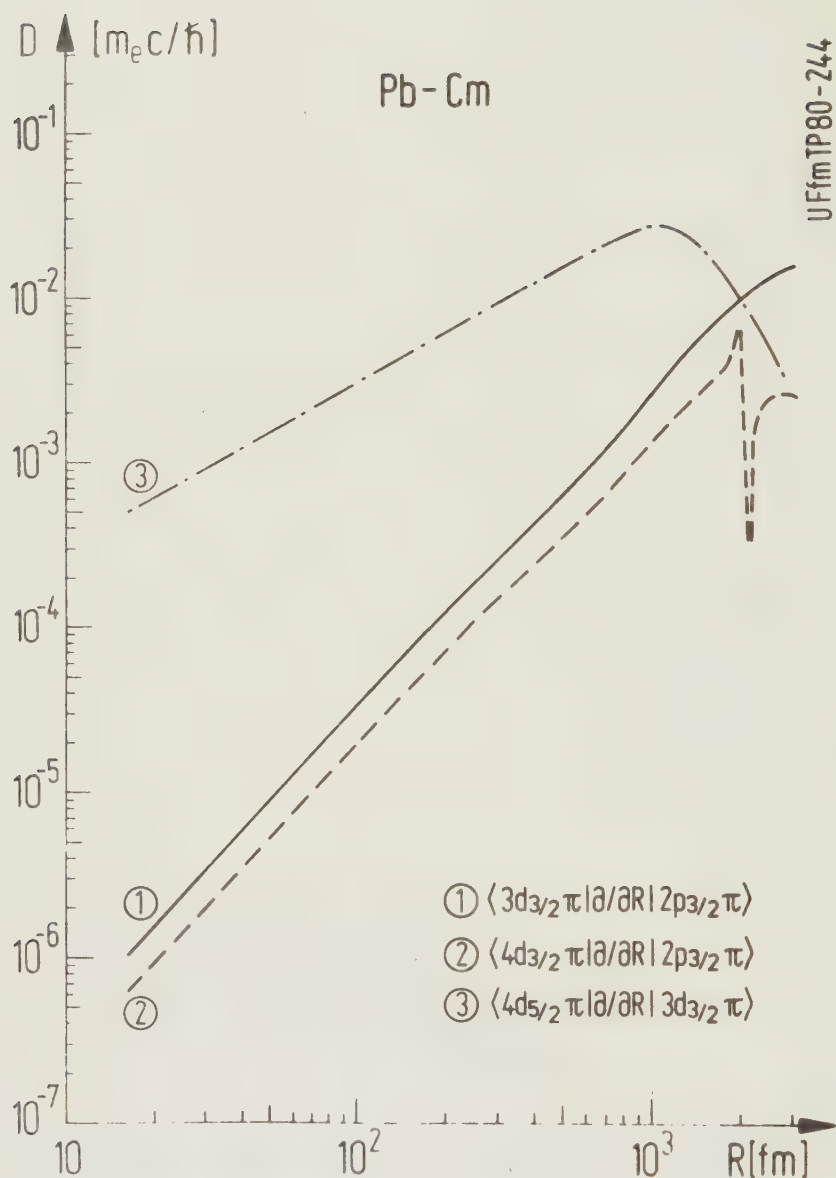


Bild 55: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

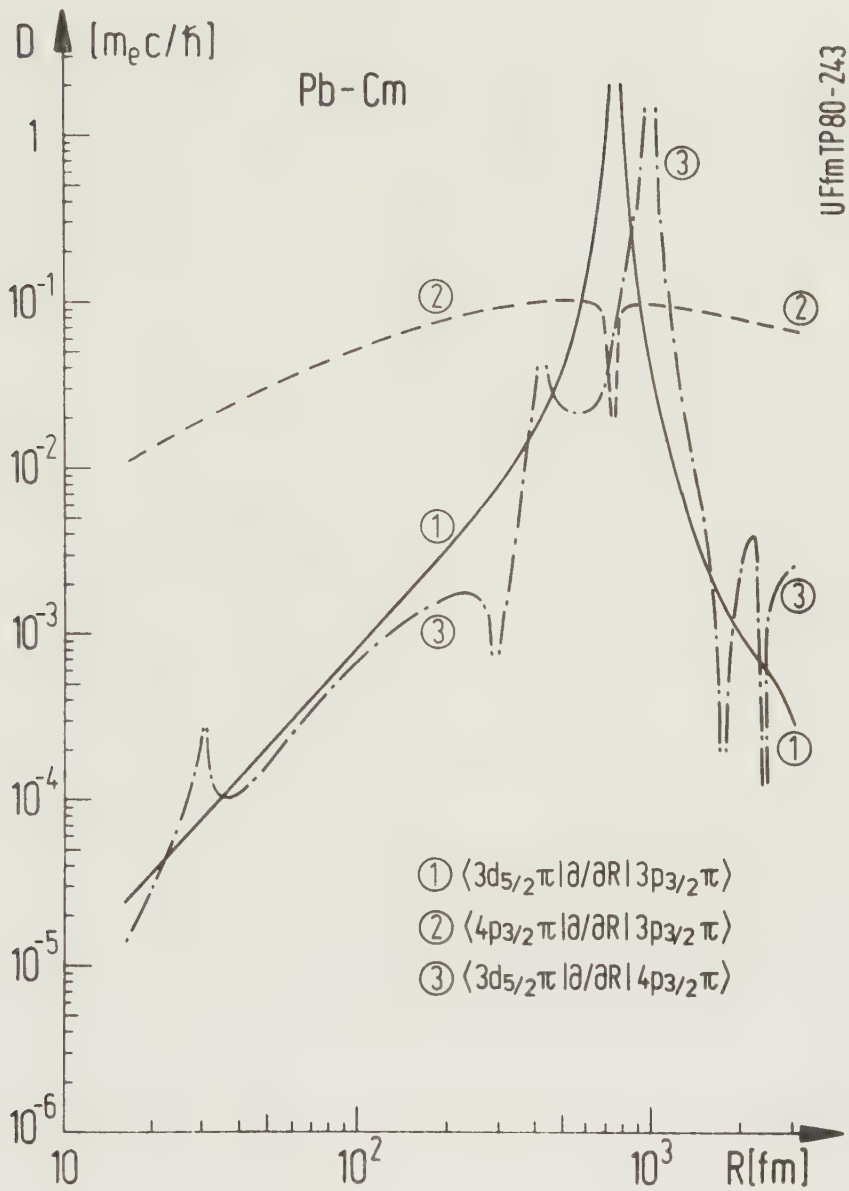


Bild 56: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

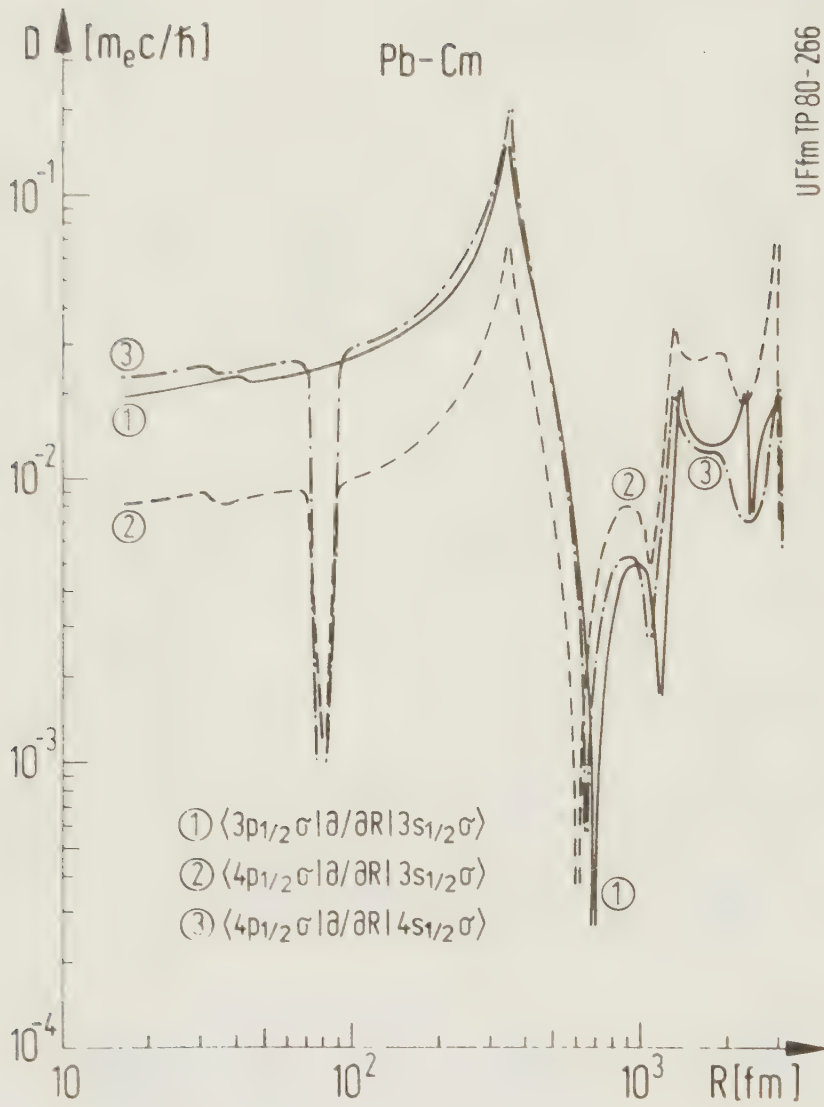


Bild 57: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

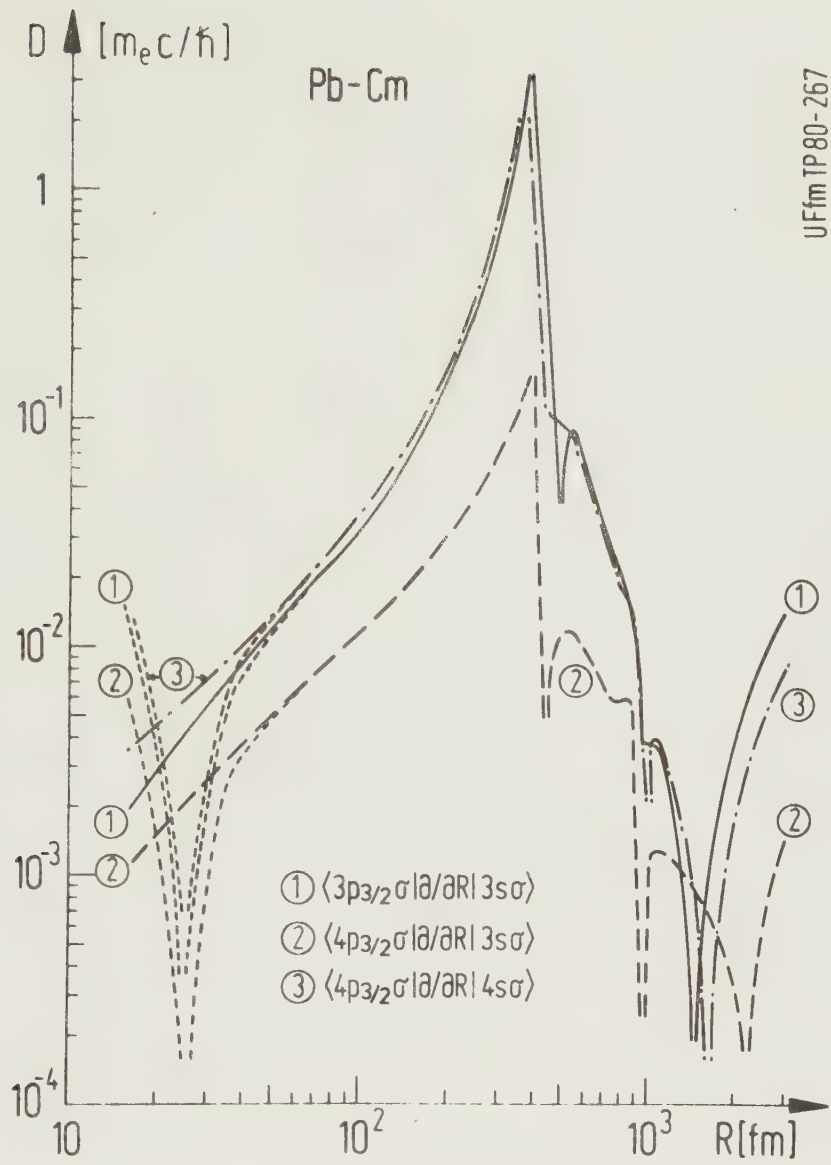


Bild 58: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

Gepunktete Linie: Punktkerne

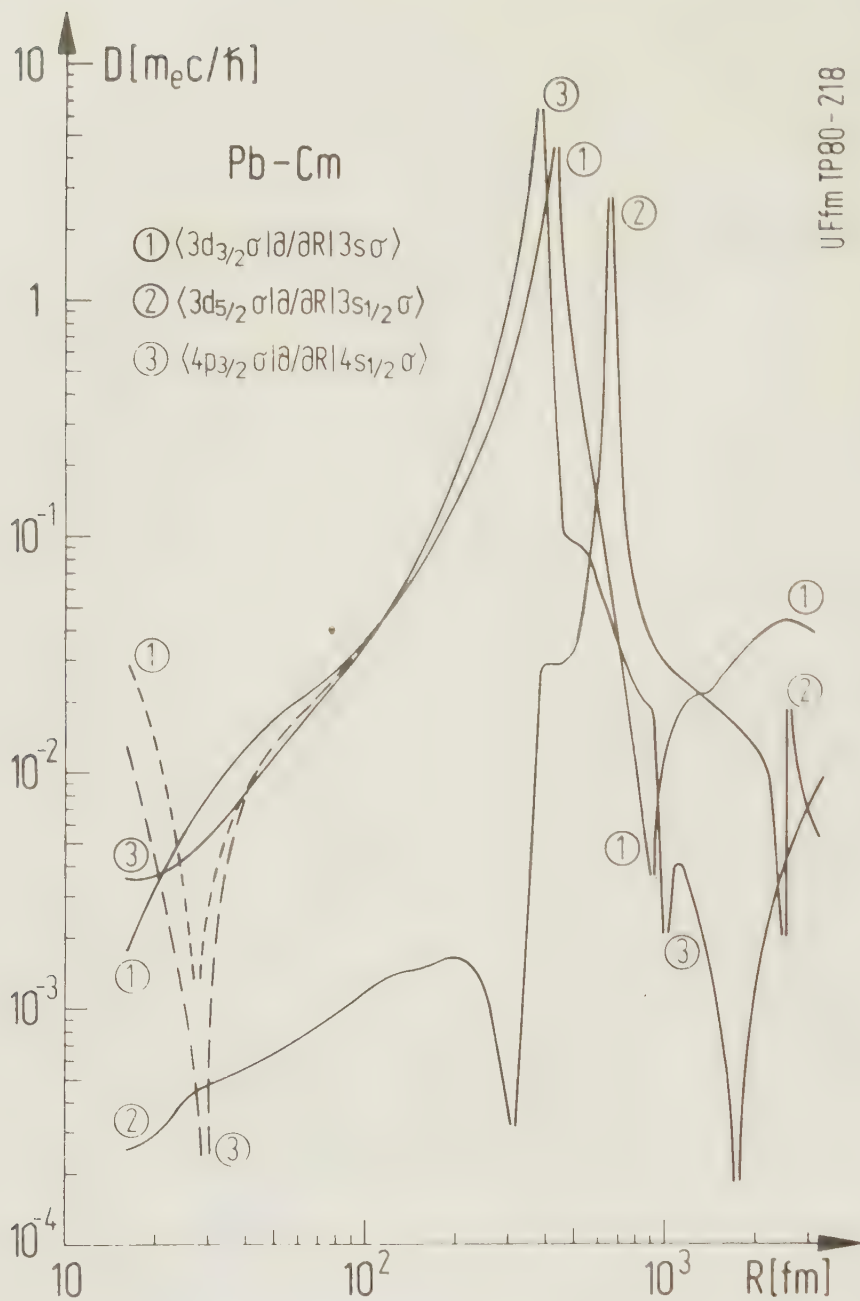


Bild 59: Der Betrag der radialen Matrixelemente des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

Durchgezogene Linien: ausgedehnte Kerne

Gestrichelte Linien: Punktkerne

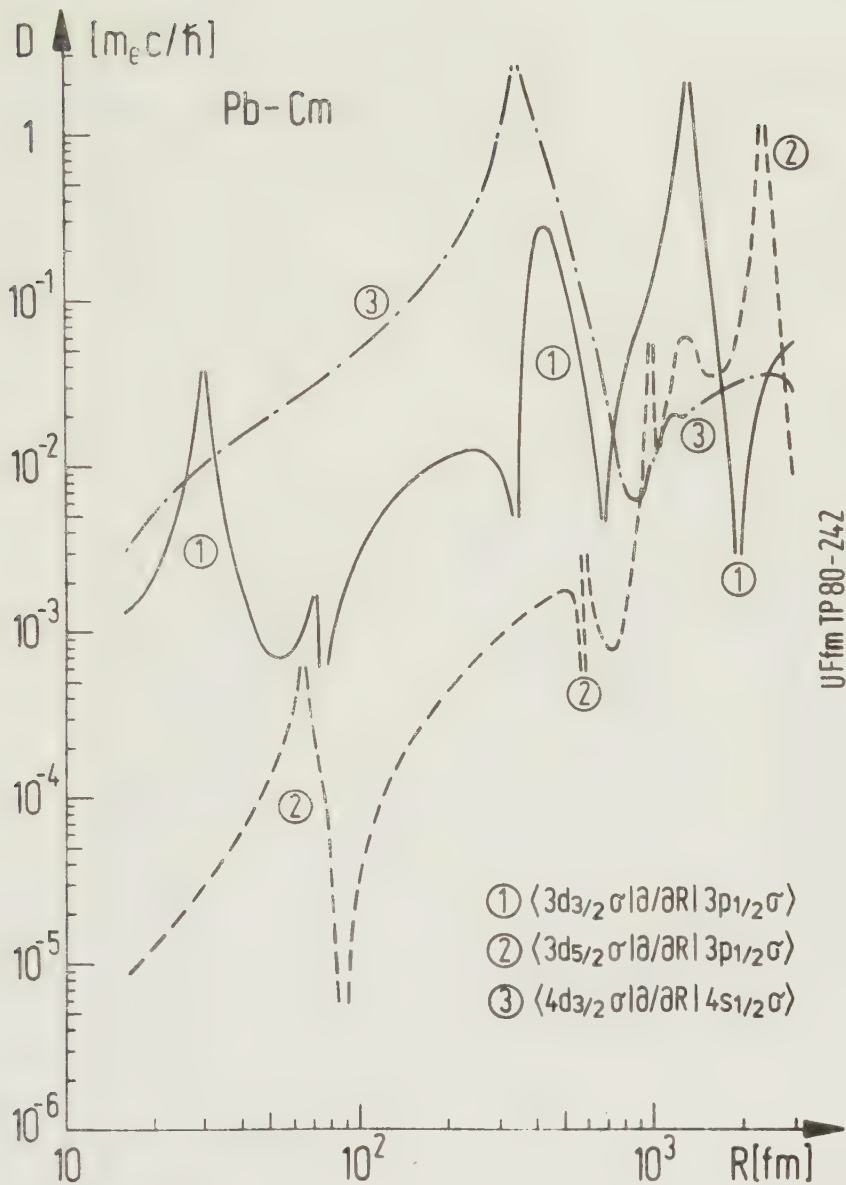


Bild 60: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

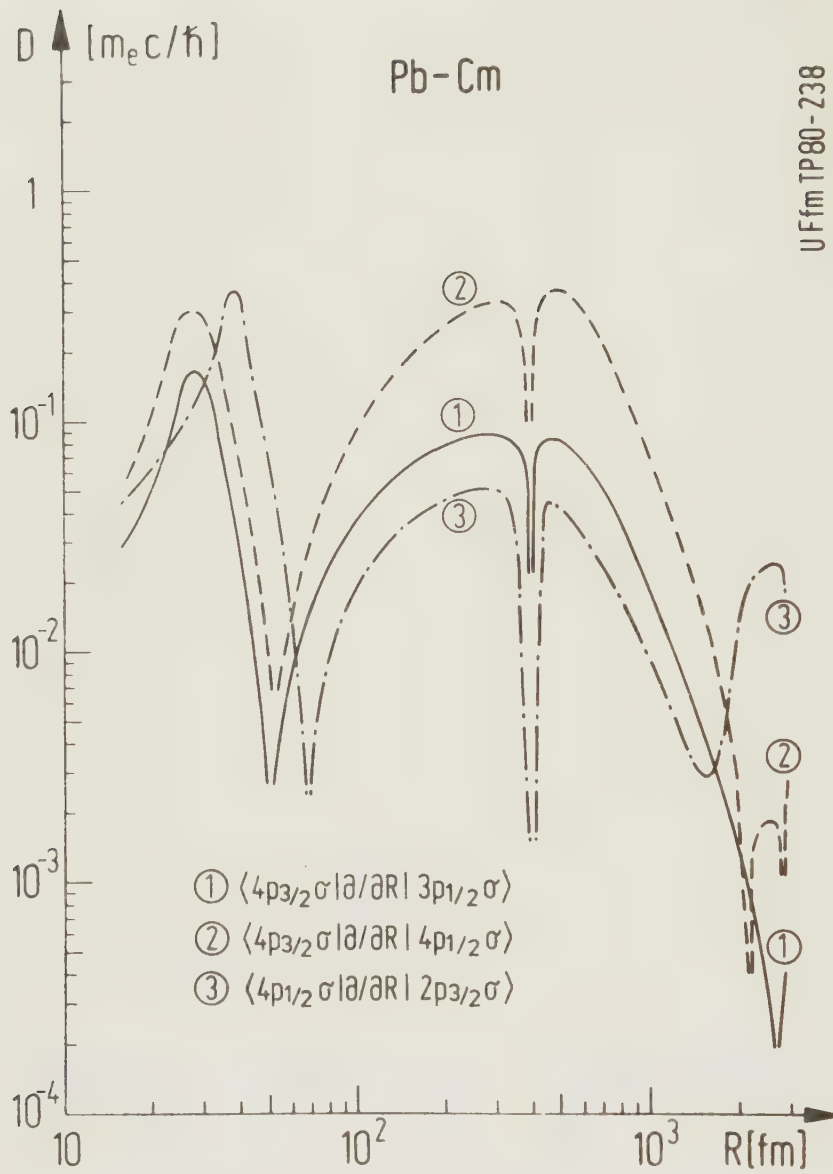


Bild 61: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

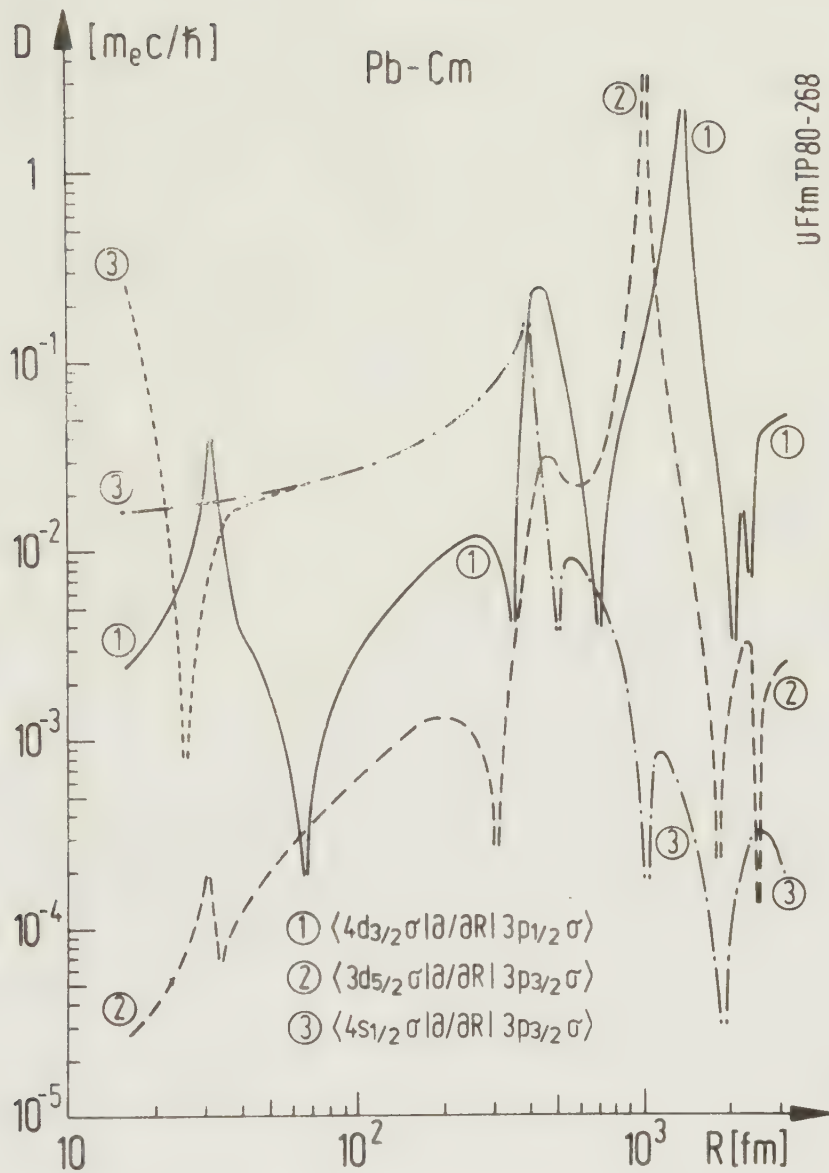


Bild 62: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.
Gepunktete Linie: Punktkerne

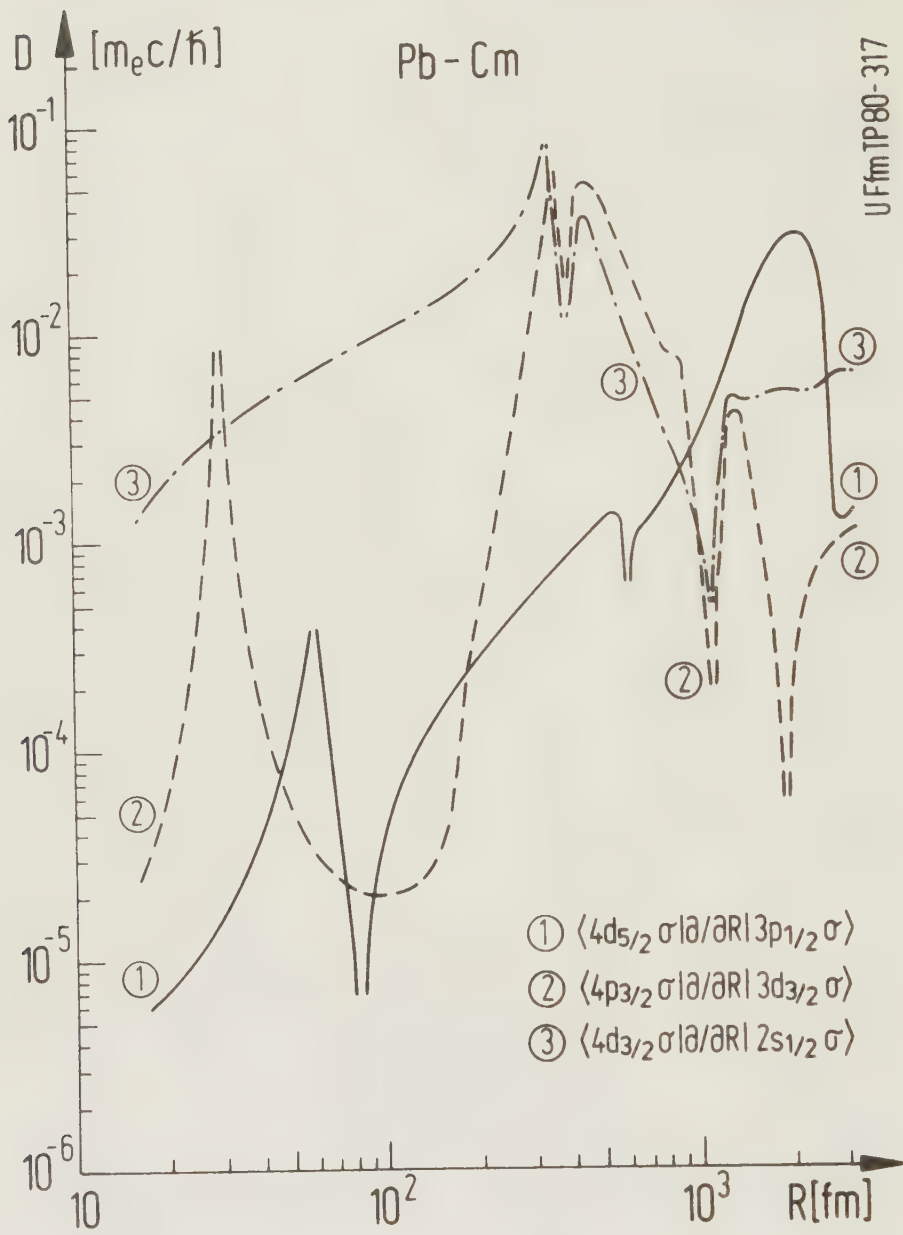


Bild 63: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

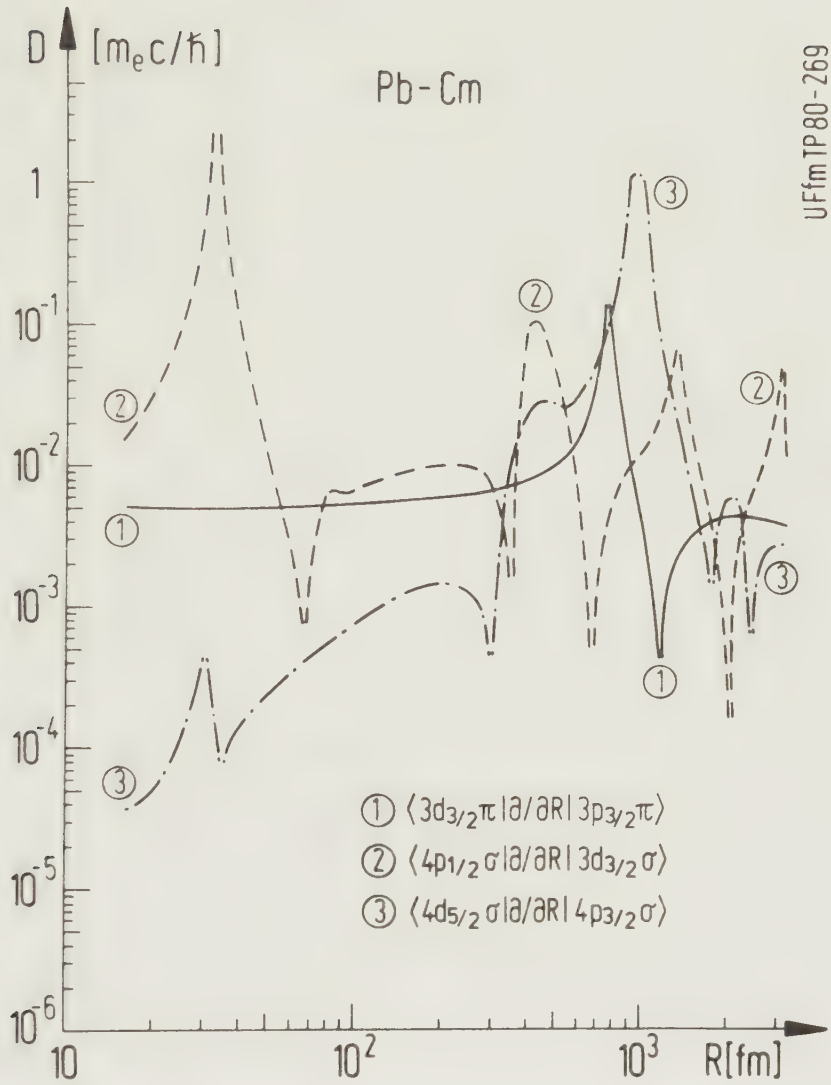


Bild 64: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

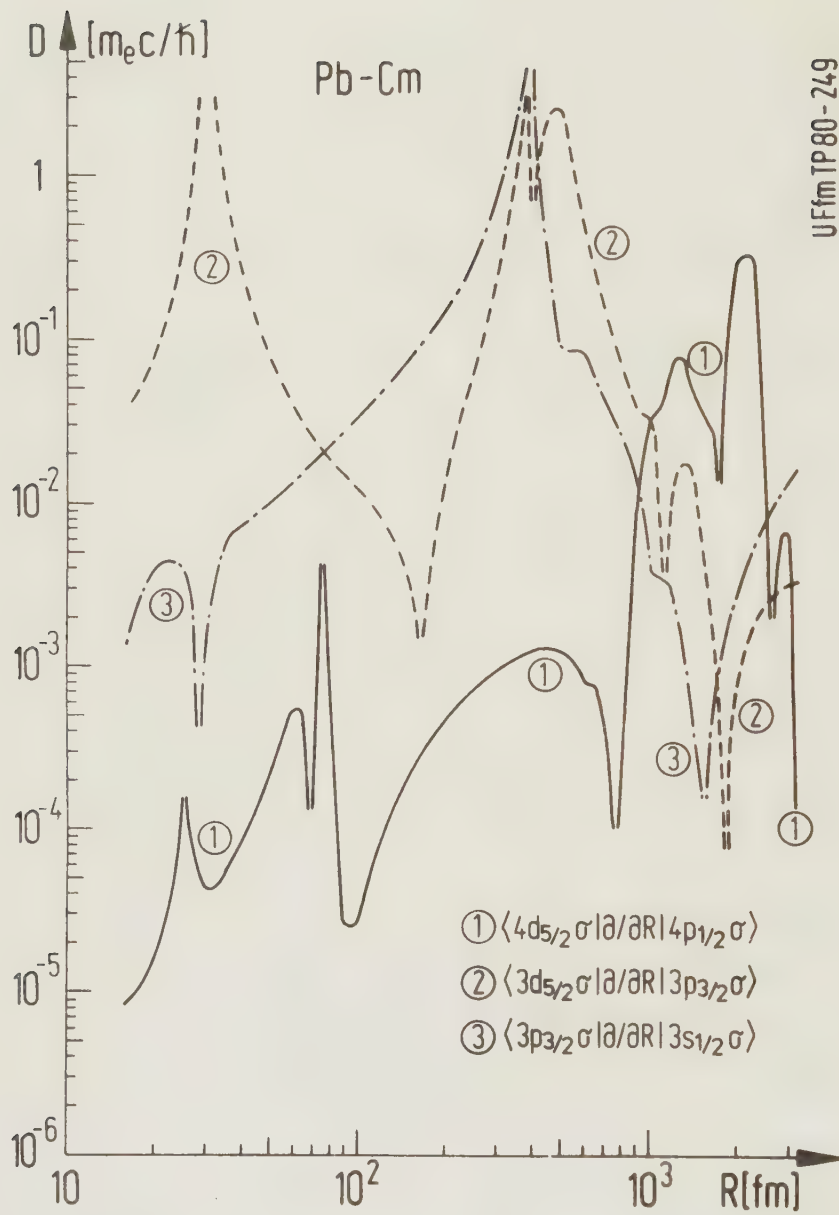


Bild 65: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

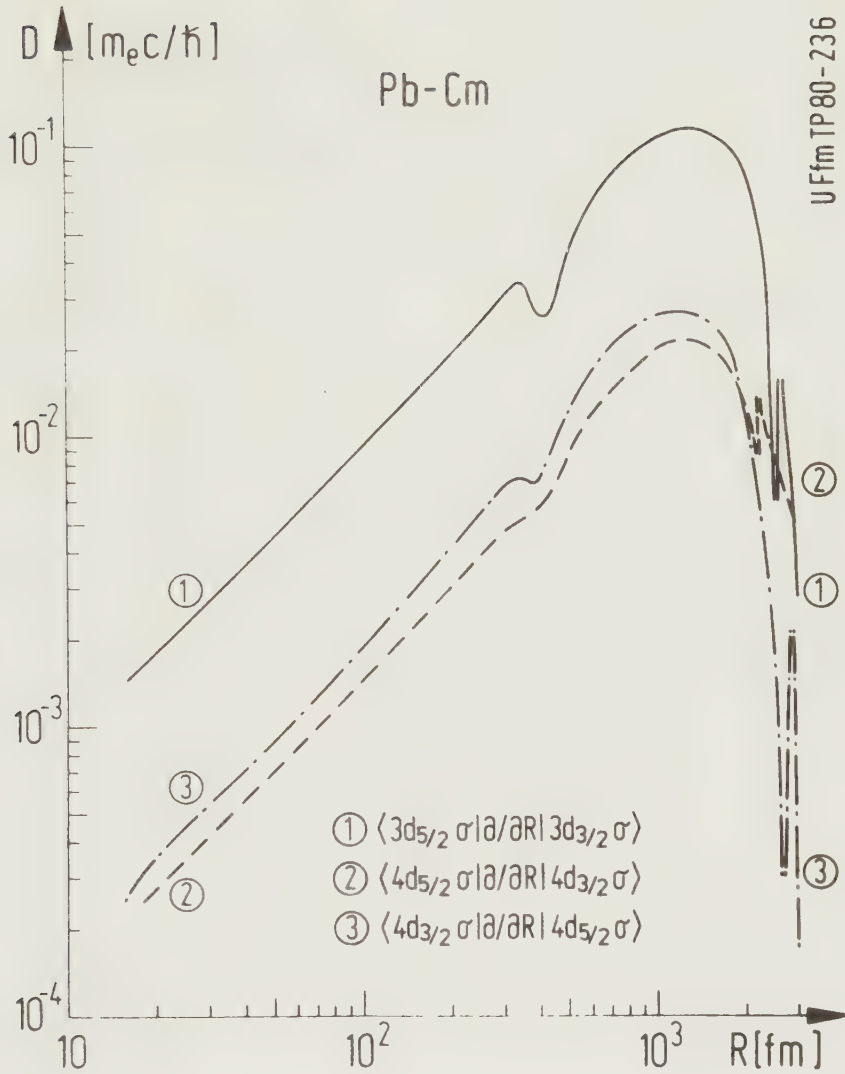


Bild 66: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

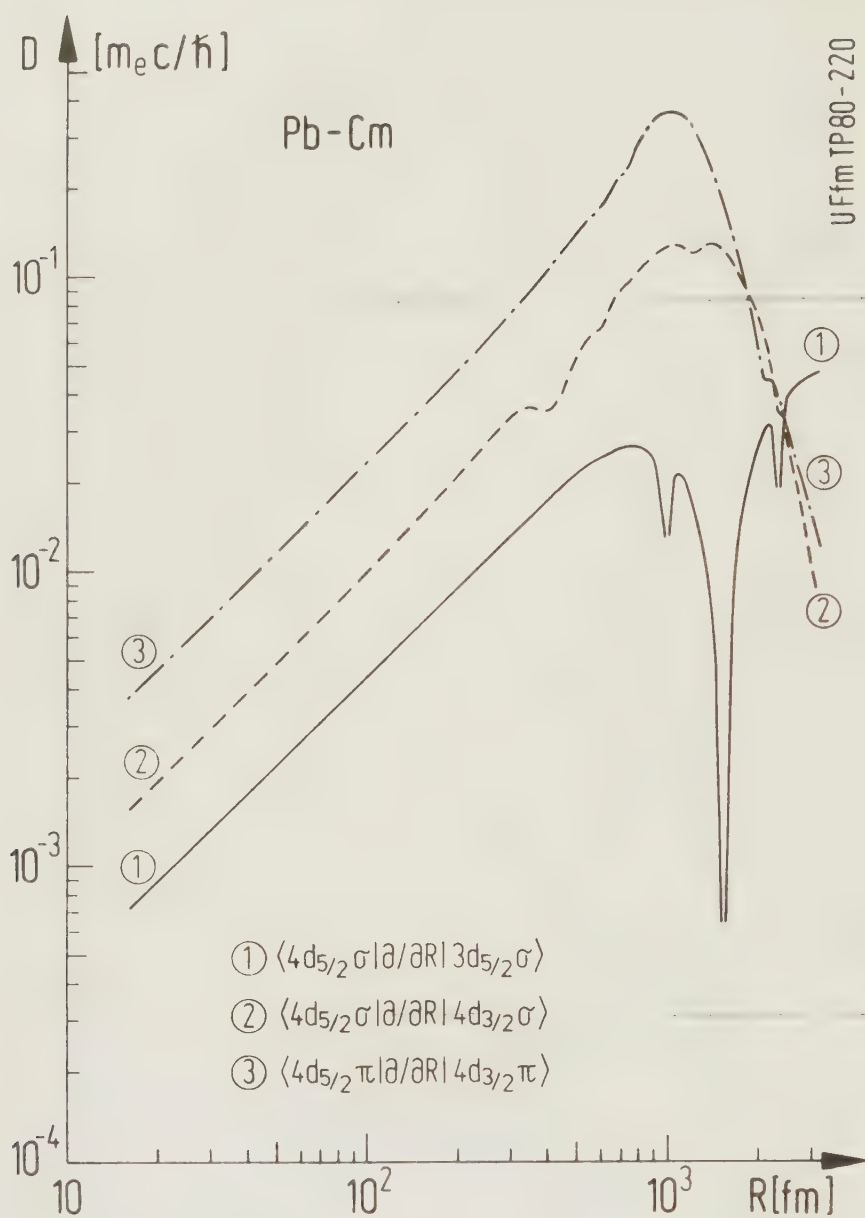


Bild 67: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

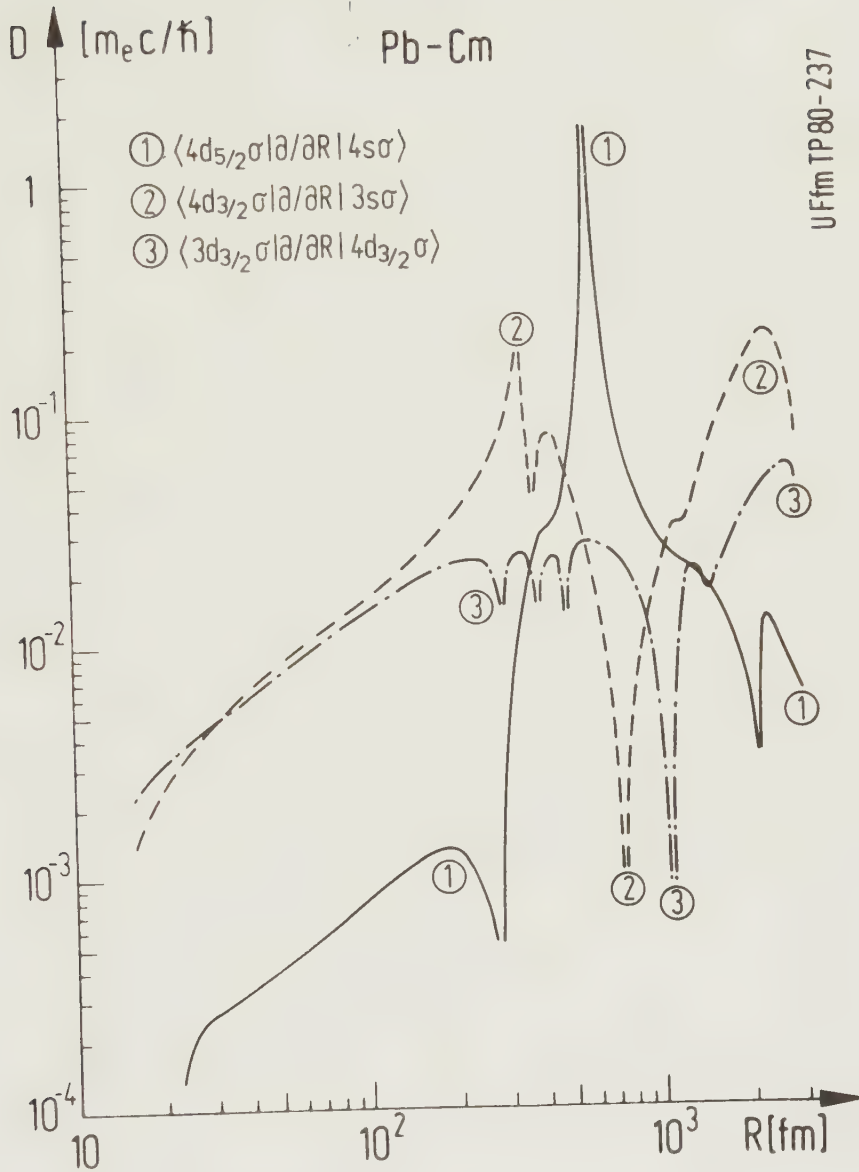


Bild 68: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

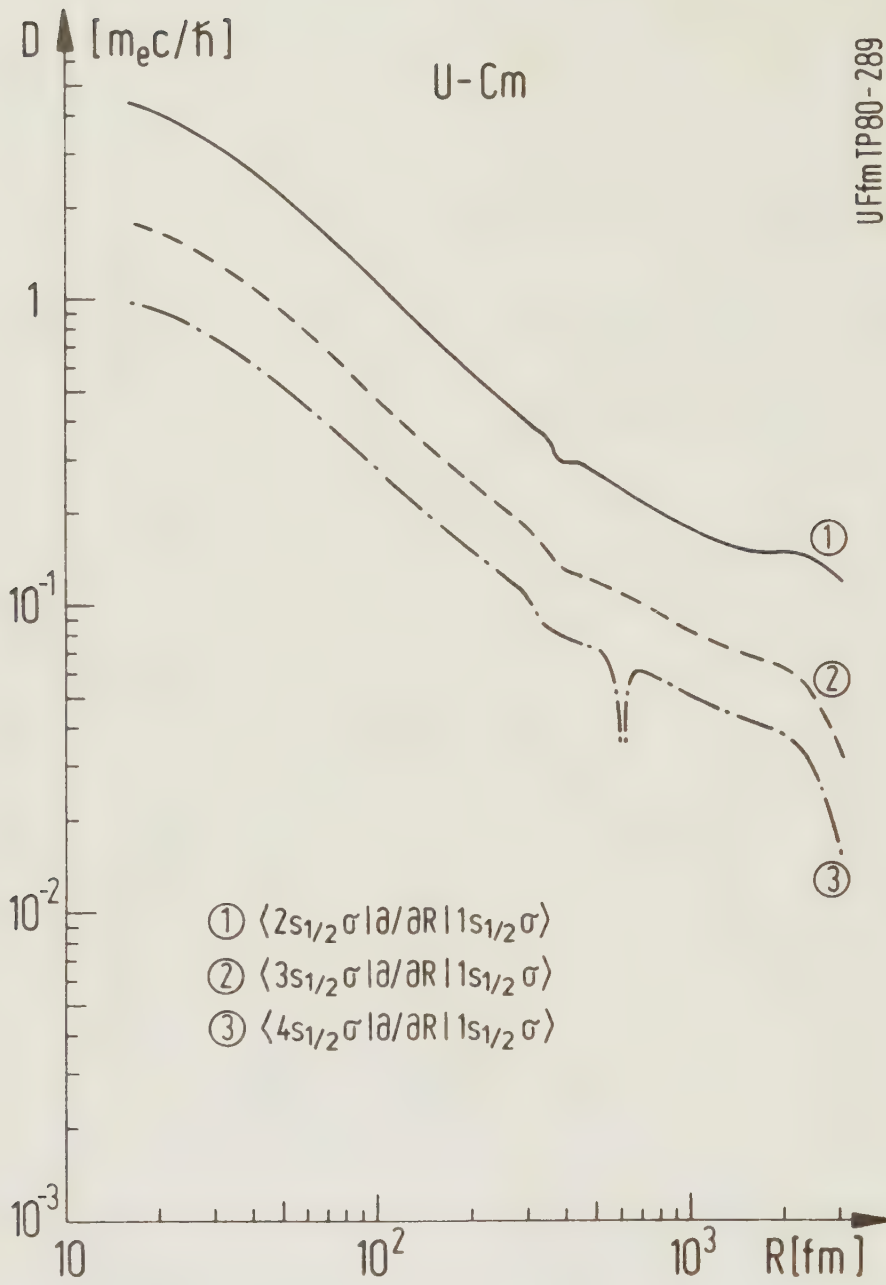


Bild 69: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des U-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

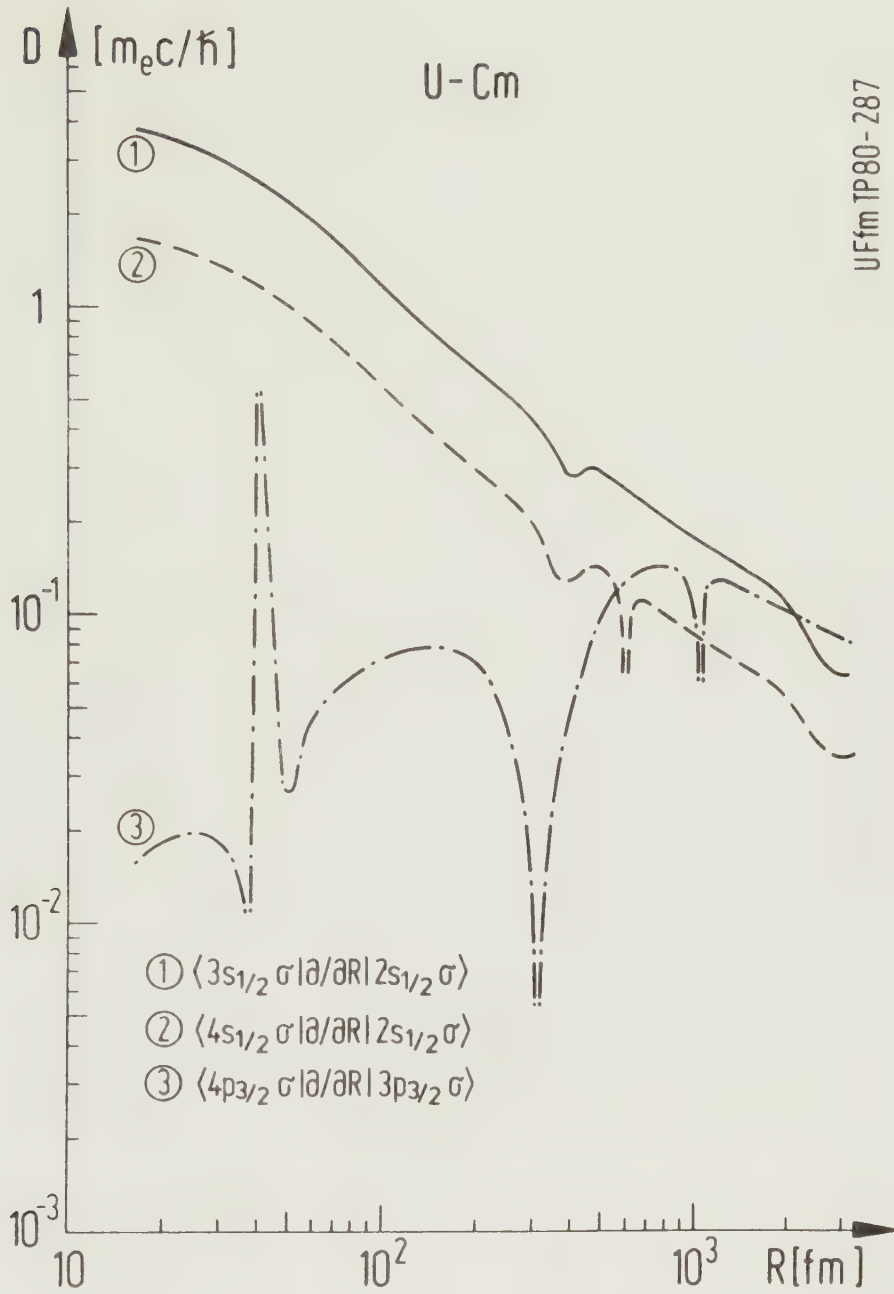


Bild 7o: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des U-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

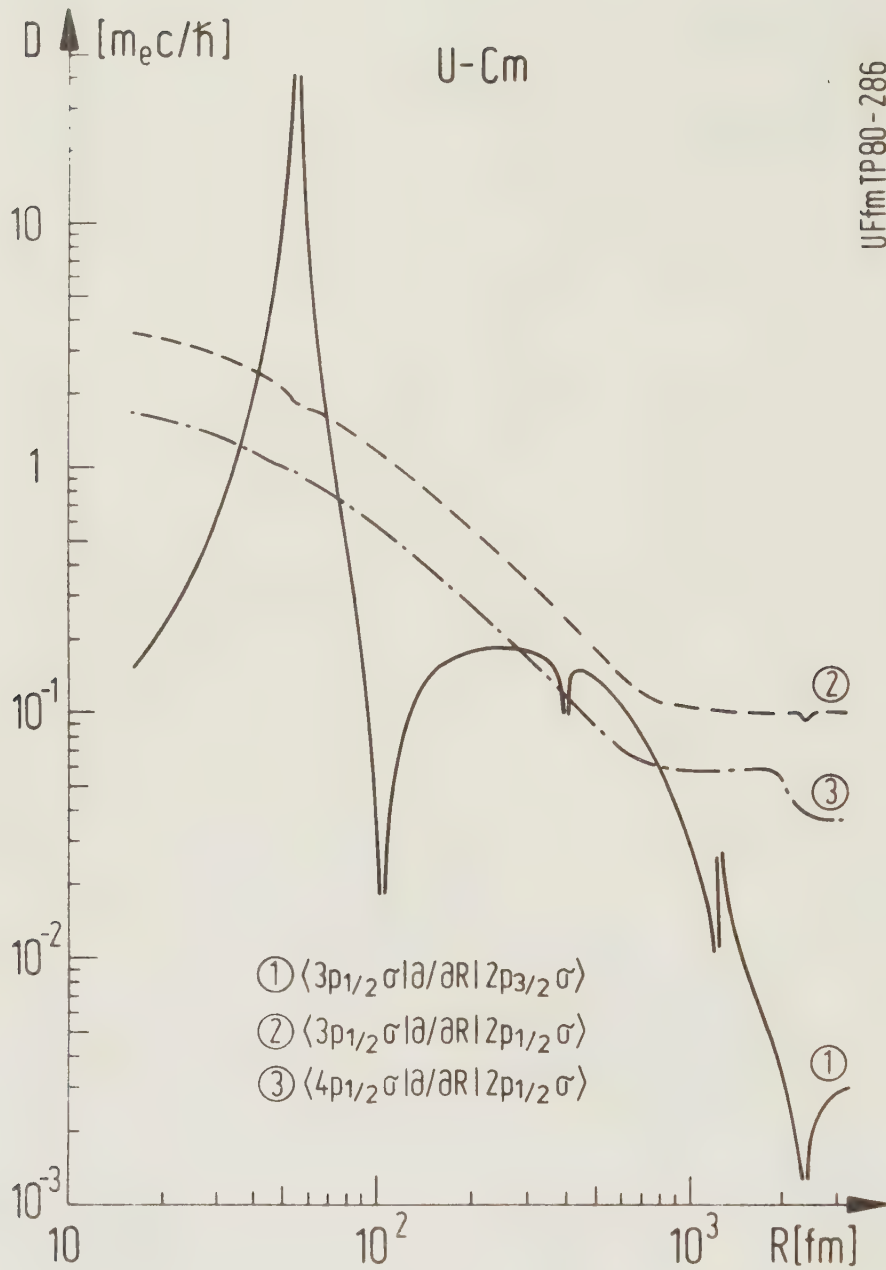


Bild 71: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des U-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

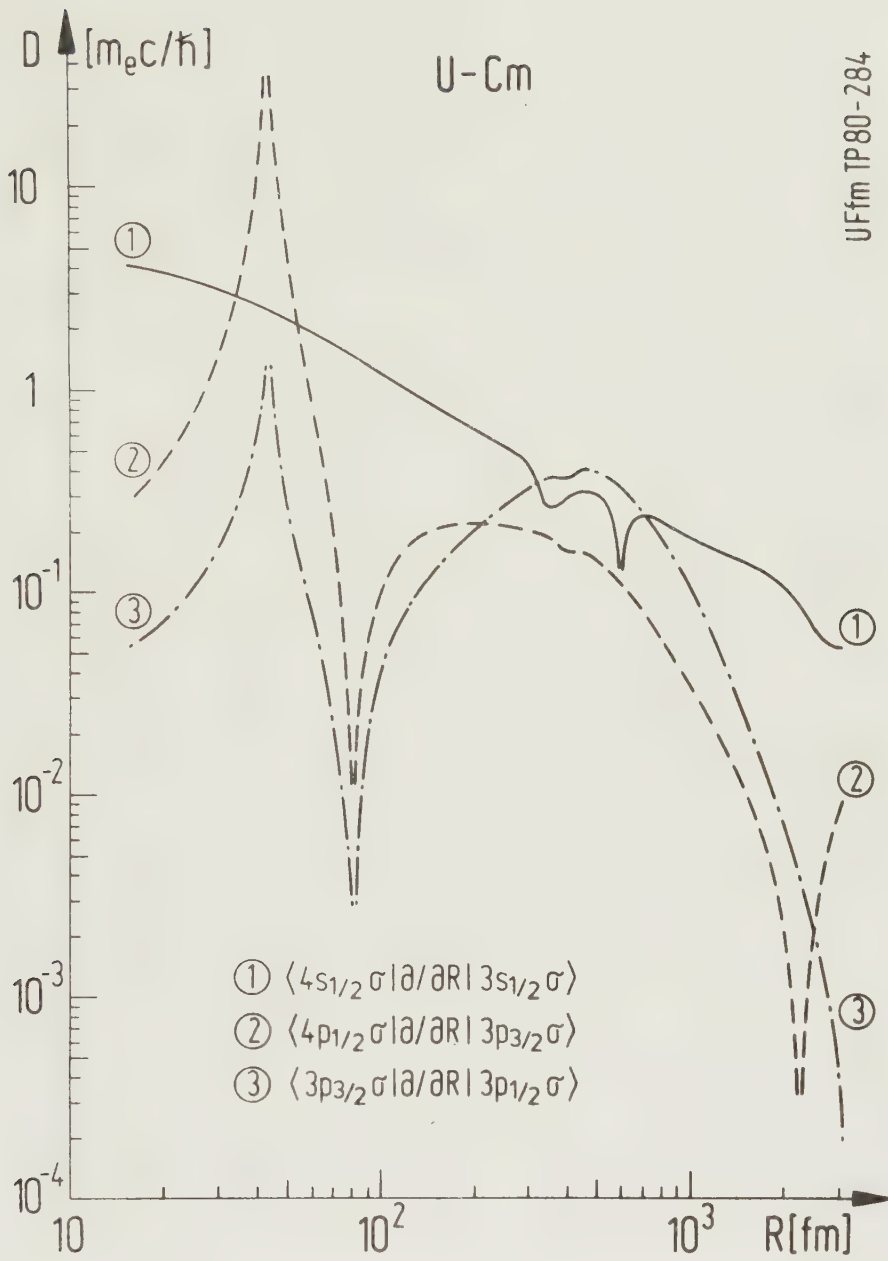


Bild 72: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des U-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

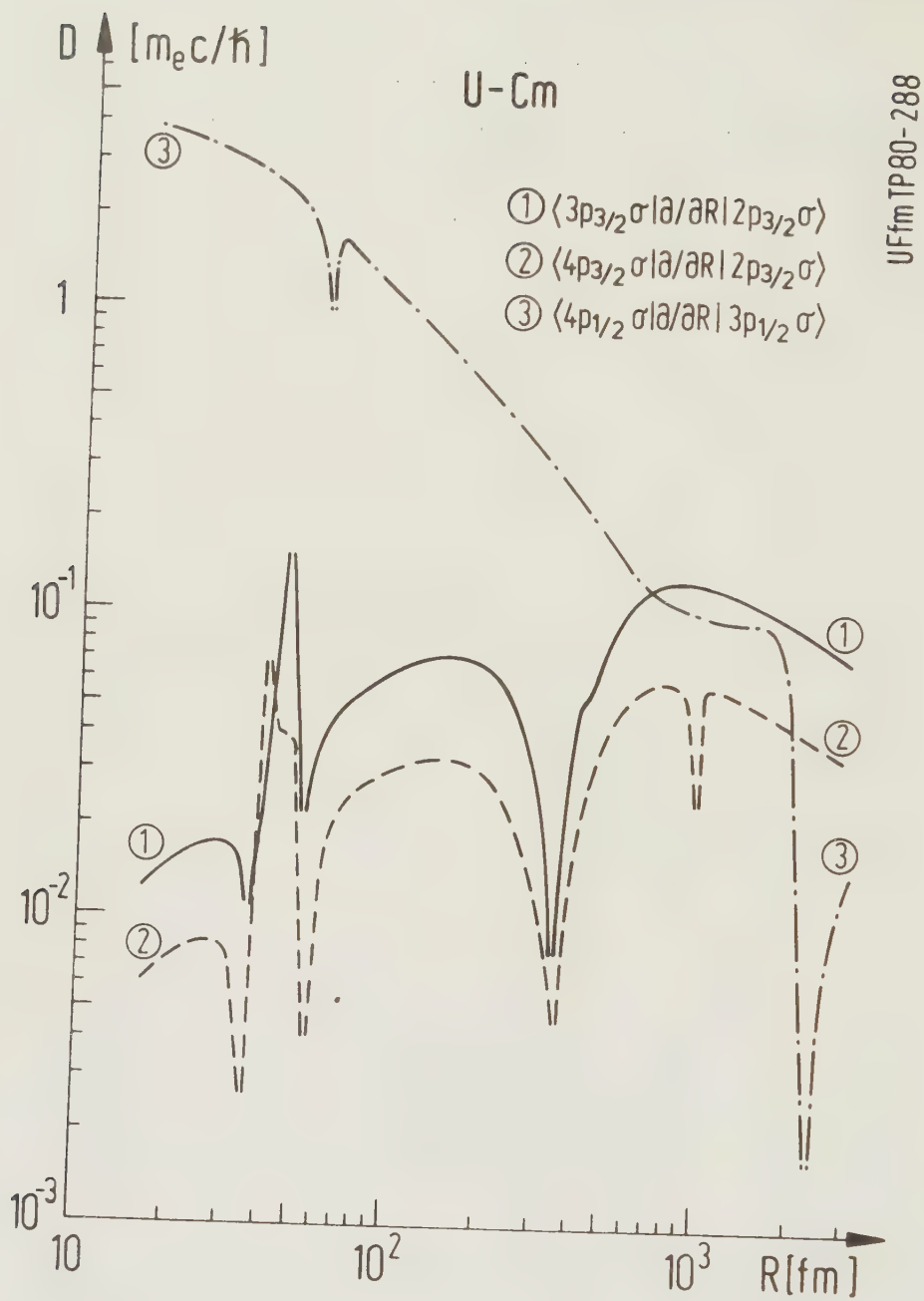


Bild 73: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des U-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

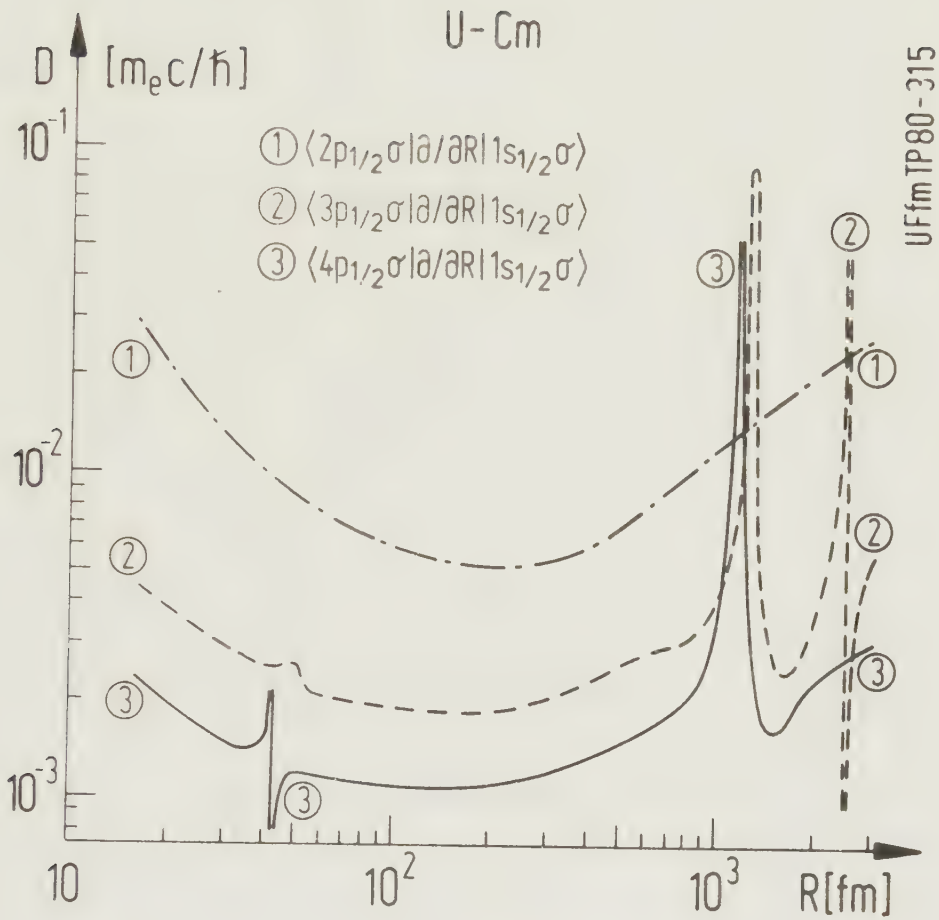


Bild 74: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des U-Cm-Quasimoleküles in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

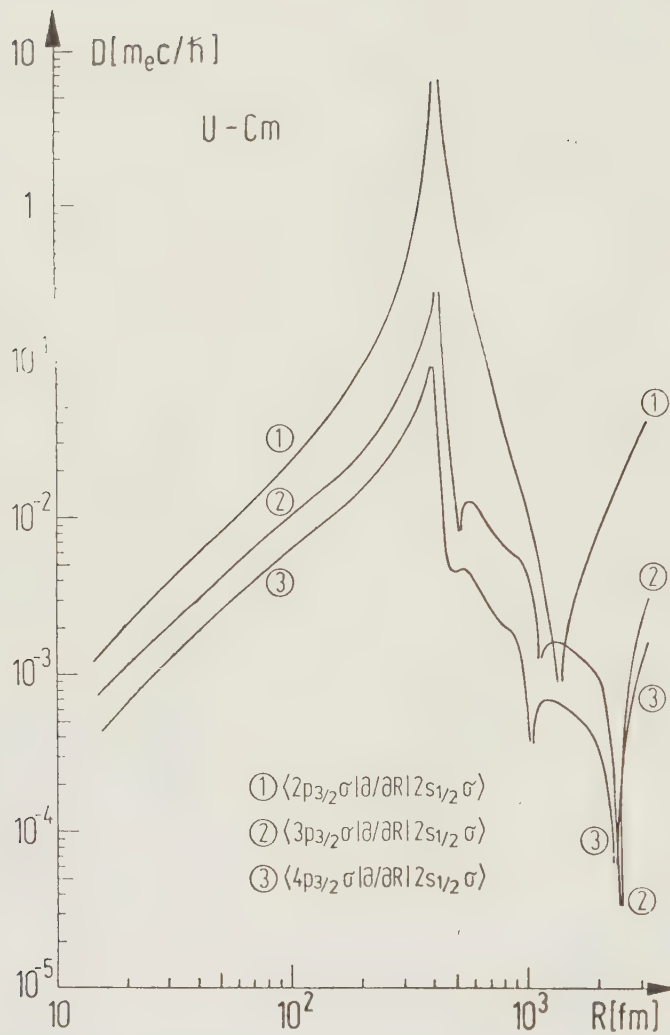


Bild 75: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des U-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

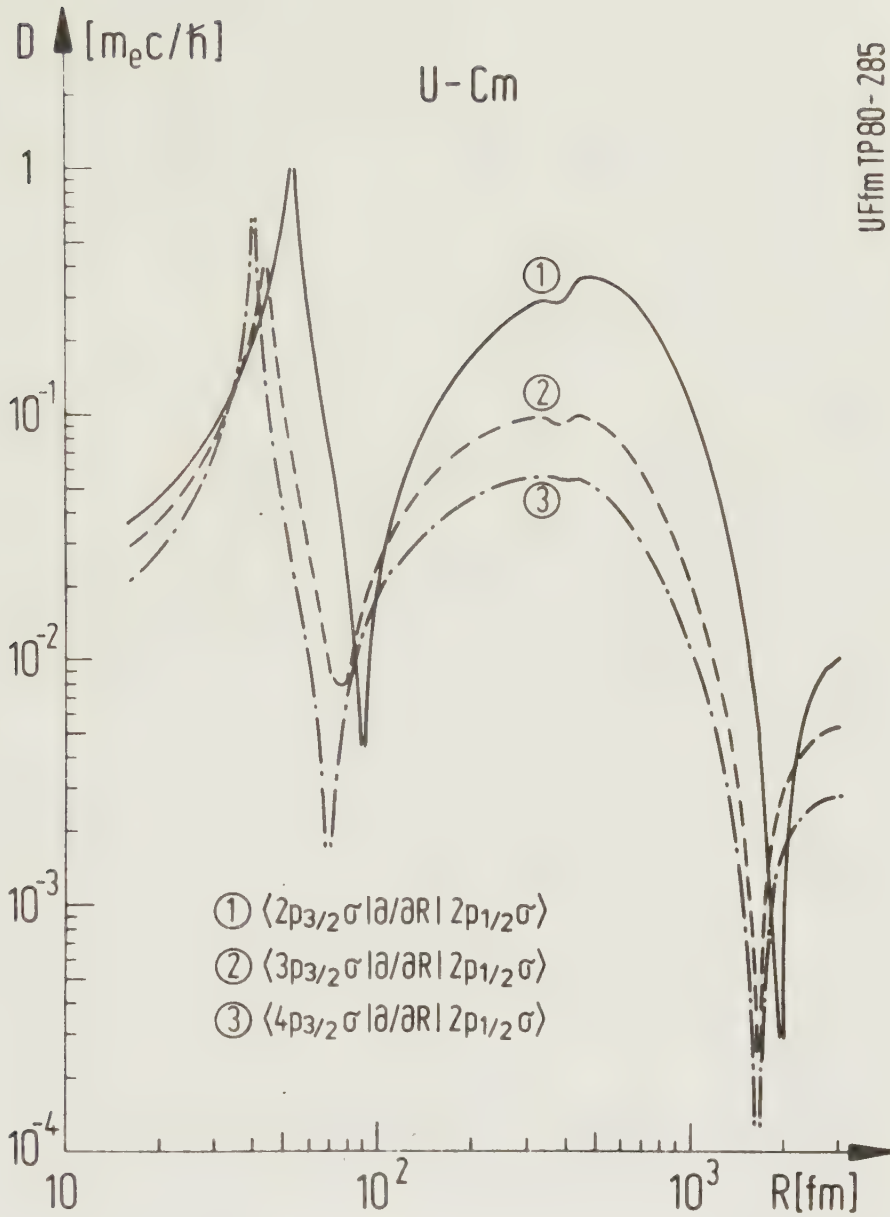


Bild 76: Der Betrag der radialen Matrixelemente (ausgedehnte Kerne) des U-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

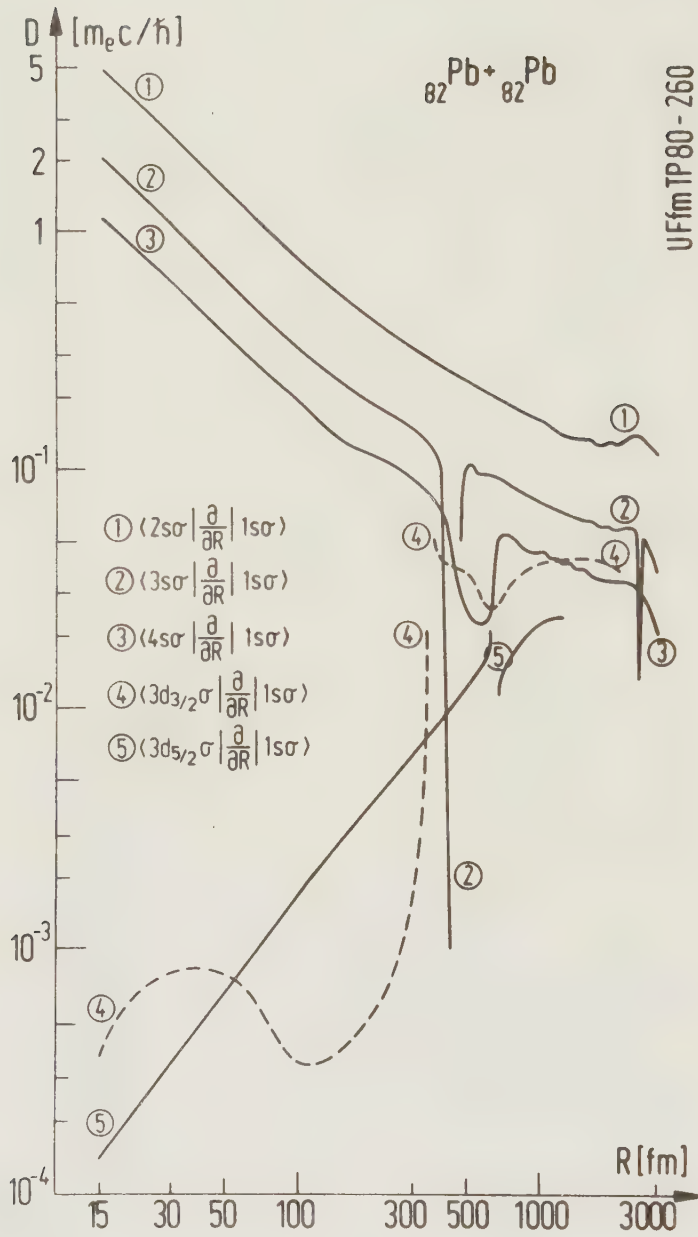


Bild 77: Der Betrag der radialen Matrixelemente (Punktkerne) des Pb-Pb-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

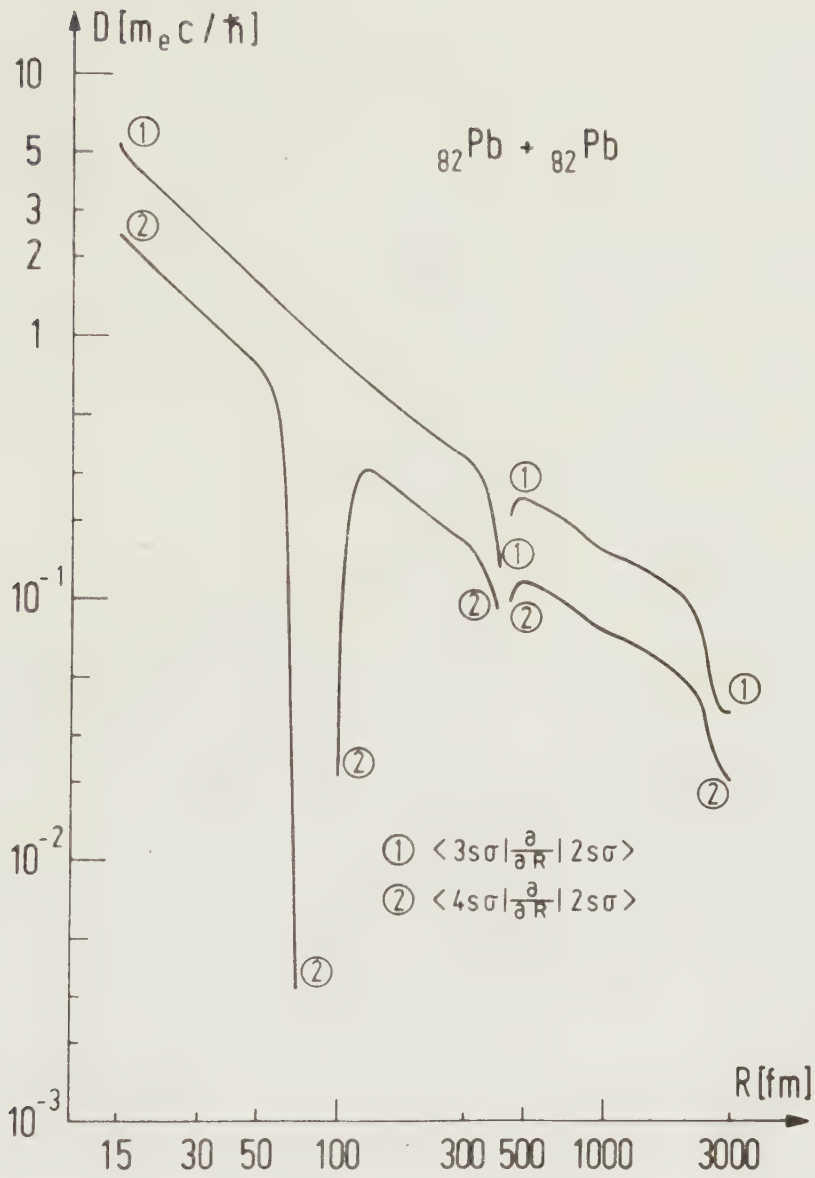


Bild 78: Der Betrag der radialen Matrixelemente (Punktkerne) des Pb-Pb-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

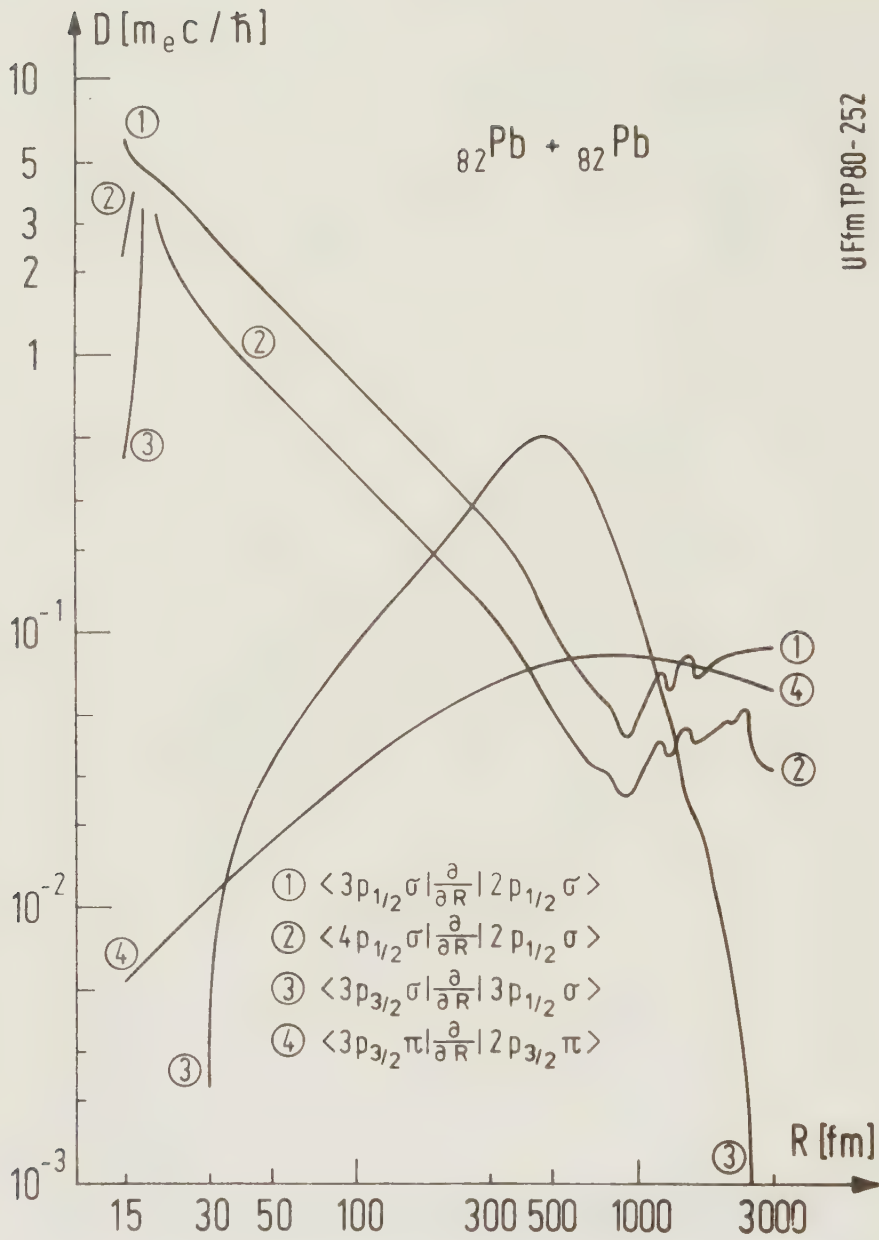


Bild 79: Der Betrag der radialen Matrixelemente (Punktkerne) des Pb-Pb-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.

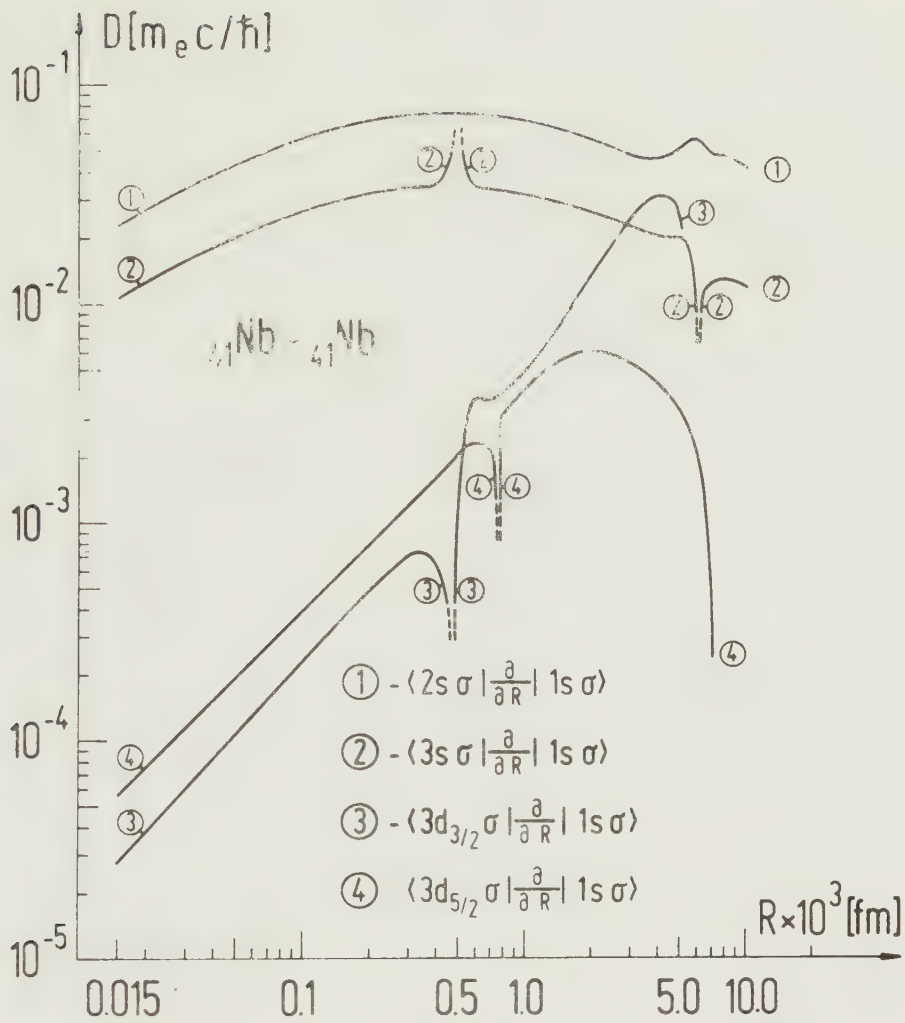


Bild 80: Die radialen Matrixelemente des Nb-Nb-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.⁷⁰

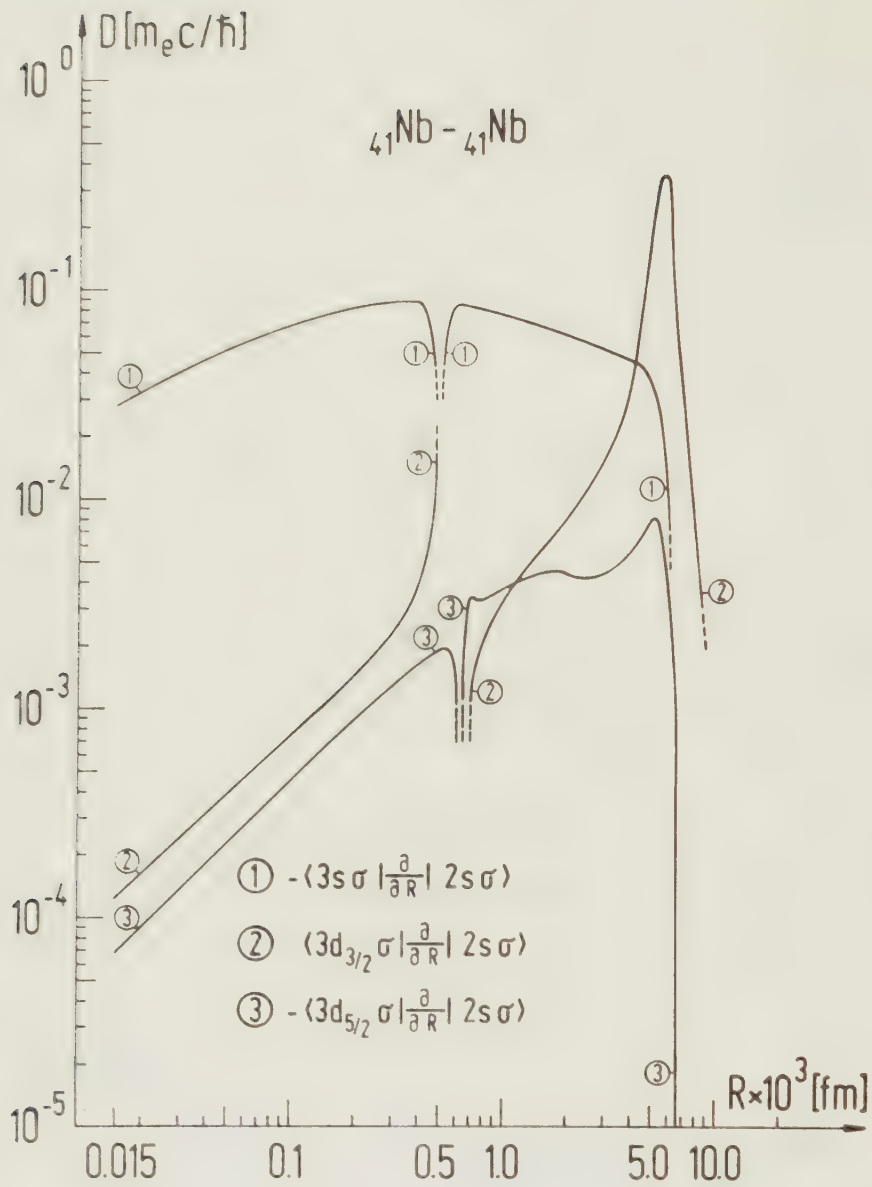


Bild 81: Die radialen Matrixelemente des Nb-Nb-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.⁷⁰

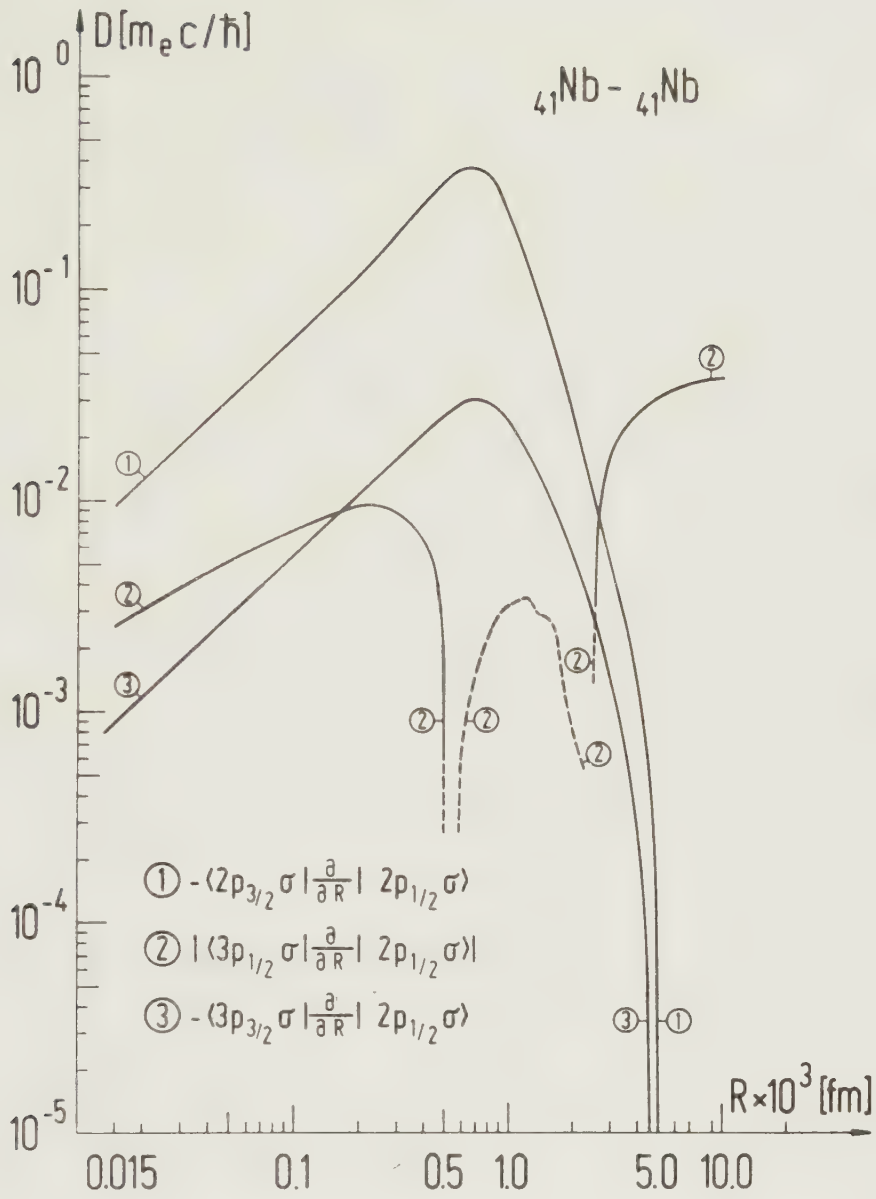


Bild 82: Die radialen Matrixelemente des Nb-Nb-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.⁷⁰

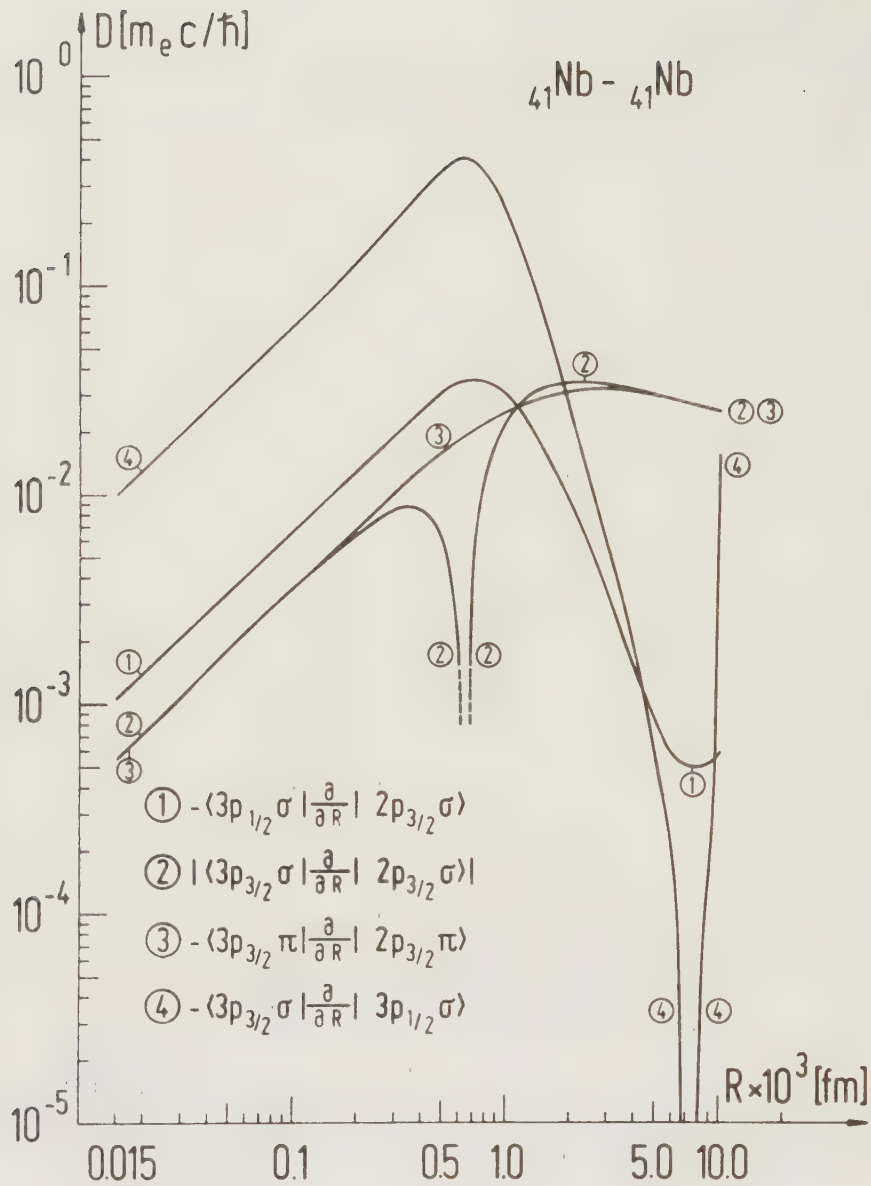


Bild 83: Die radialen Matrixelemente des Nb-Nb-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom internuklearen Abstand.⁷⁰

VII.1.e Die radialen Matrixelemente in der Monopolapproximation

In Kapitel IV.4 hatten wir die Energieniveaus der Quasimoleküle, berechnet in der Monopolapproximation, verglichen mit den exakten Zweizentrenenergien. Wird bei der Berechnung der radialen Matrixelemente nur der $l=0$ Term des nach Multipolen entwickelten Zweizentrenpotentials verwendet (Gleichungen 5-8) (selbstverständlich sind auch die Wellenfunktionen in der Monopolapproximation berechnet worden), so erhalten wir als Monopolnäherung der radialen Matrixelemente

$$\begin{aligned} \langle \phi_{f\mu}(r) | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_{i\bar{\mu}}(r) \rangle &= \frac{\delta_{\mu\bar{\mu}}}{(E_i - E_f)} \left(A_{(\kappa, 0, \bar{\kappa})}^{\mu} \int_0^{\infty} r^2 dr F_{\mu\kappa}(r) \frac{\partial V_o}{\partial R} f_{\mu\bar{\kappa}}(r) \right. \\ &+ \left. A_{(-\kappa, 0, -\bar{\kappa})}^{\mu} \int_0^{\infty} r^2 dr G_{\mu\kappa}(r) \frac{\partial V_o}{\partial R} g_{\mu\bar{\kappa}}(r) \right) \end{aligned} \quad (\text{VII.34})$$

mit (für Punktkerne)

$$\frac{\partial V_o}{\partial R} = \begin{cases} + \sum_{i=1}^2 \alpha_i \frac{Z_i e^2}{S_i^2} & \text{für } r \leq S_i \\ 0 & \text{für } r > S_i \end{cases} \quad (\text{VII.35})$$

bzw. (für ausgedehnte Kerne)

$$\frac{\partial V_0}{\partial R} = \begin{cases} + \sum_{i=1}^2 \alpha_i \frac{Z_i e^2}{S_i^2} & \text{für } r \leq S_i - a_i \\ \dots\dots\dots & \\ - \frac{3}{2} \frac{Z_i e^2}{a_i^2} \left[- \frac{a_i^3}{3S_i^2} + \frac{1}{24} \left(\frac{3S_i^2}{r} - \frac{r^3}{S_i^2} \right) - \frac{a_i^2}{4} \left(\frac{1}{r} - \frac{r}{S_i^2} \right) - \frac{S_i}{3} + \frac{r}{4} + \frac{a_i^4}{8rS_i^2} \right] & \text{für } S_i - a_i \leq r \leq S_i + a_i \\ \dots\dots\dots & \\ 0 & \text{für } r \geq S_i + a_i \end{cases} \quad (\text{VII.36})$$

Als Beispiel zeigen wir in Bild 84 zwei radiale Matrixelemente des Pb-Pb-Quasimoleküls zwischen den gebundenen ns² Zuständen in der Monopolapproximation und vergleichen diese Daten mit den exakten Zweizentrenrechnungen. Wir finden im Bereich $20\text{fm} \leq R \leq 400\text{fm}$ eine maximale Abweichung von 2%. Dieselbe gute Übereinstimmung fanden wir auch für das U-U-System. In Tabelle 15 vergleichen wir für drei Abstände R sowohl für das symmetrische Er-Er als auch dem asymmetrischen Xe-Pb-System die radialen Matrixelemente in der Monopolapproximation mit den exakten Zweizentrenrechnungen⁴⁰. Die Zahlenwerte der $\frac{\partial}{\partial R}$ -Matrixelemente sind in natürlichen Einheiten wiedergegeben $\hbar=c=m_e=1$.

Tabelle 15:

Z_1	Z_2	$R \text{ (fm)}$	$\langle 2s\sigma \frac{\partial}{\partial R} 1s\sigma \rangle^{\text{MP}}$	$\langle 2s\sigma \frac{\partial}{\partial R} 1s\sigma \rangle^{\text{TC}}$
68	68	100	-0.3977	-0.3849
68	68	500	-0.1830	-0.1739
68	68	1000	-0.1301	-0.1190
54	82	100	-0.3944	-0.3822
54	82	500	-0.1776	-0.1699
54	82	1000	-0.1260	-0.1187

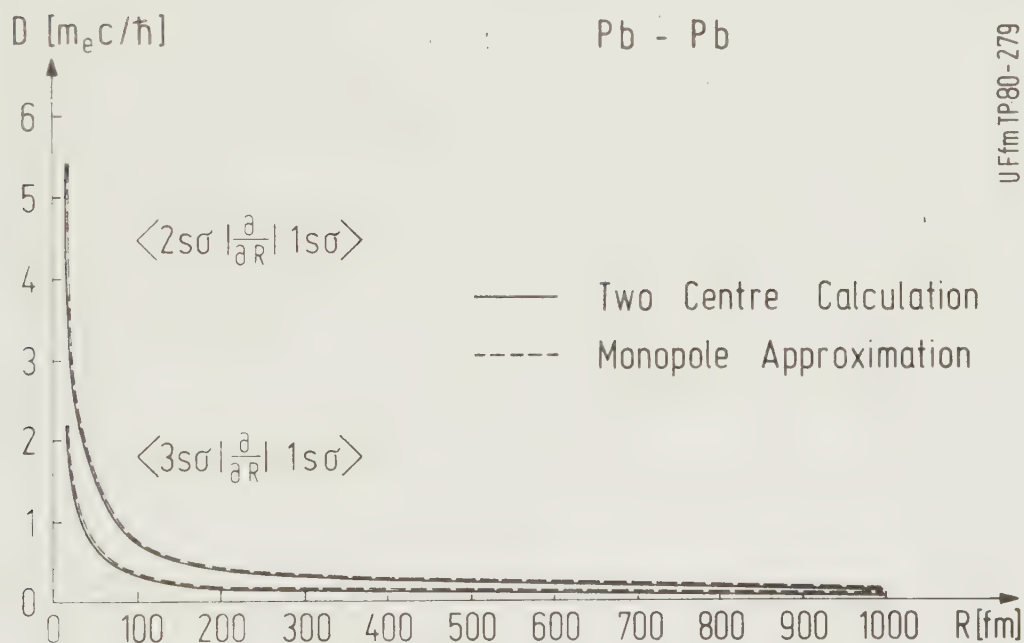


Bild 84: Vergleich der radialen Matrixelemente berechnet in der Monopolapproximation mit den exakten Zweizentrenrechnungen.

Der maximale prozentuale Unterschied sowohl für das Er-Er als auch Xe-Pb-System im Bereich $20\text{fm} \leq R \leq 50\text{fm}$ ist etwa 5%. Der Unterschied zwischen dem symmetrischen und asymmetrischen System ist in derselben Region etwa 2%.

Vergleichen wir andere radiale Matrixelemente zwischen ns oder $np_{\frac{1}{2}}$ Zuständen, so sind die Unterschiede in denselben Prozentbereichen. In den Korrelationsdiagrammen, berechnet in der Monopolapproximation, gibt es keine Zustände, die sich kreuzen und somit auch keine verbotenen Kreuzungen. Die Spitzen der Matrixelemente, hervorgerufen durch verbotene Kreuzungen, tauchen in den Monopolrechnungen nicht auf.

Zum anderen gibt es auch eine Anzahl von $\frac{\partial}{\partial R}$ Kopplungen, die in der Monopolapproximation nicht existieren, jedoch in der exakten Zweizentrenrechnung nicht vernachlässigbare Werte annehmen. Als Beispiel zeigen wir in Bild 85 das radiale Matrixelement $\langle 2p_{\frac{3}{2}} | \frac{\partial}{\partial R} | 2p_{\frac{1}{2}} \rangle$ des Pb-Pb-Systems. Der $2p_{\frac{3}{2}}$ Zustand hat bei ca. 20fm eine verbotene Kreuzung mit dem $3p_{\frac{1}{2}}$ Zustand, die kurzfristig den prozentualen Anteil der radialen Komponenten der an der verbotenen Kreuzung beteiligten Wellenfunktionen (Kapitel VI) verändern. Deshalb hat ein Matrixelement im Kreuzungsbereich einen Peak, wenn ein oder beide Zustände des Matrixelementes an der verbotenen Kreuzung beteiligt sind.

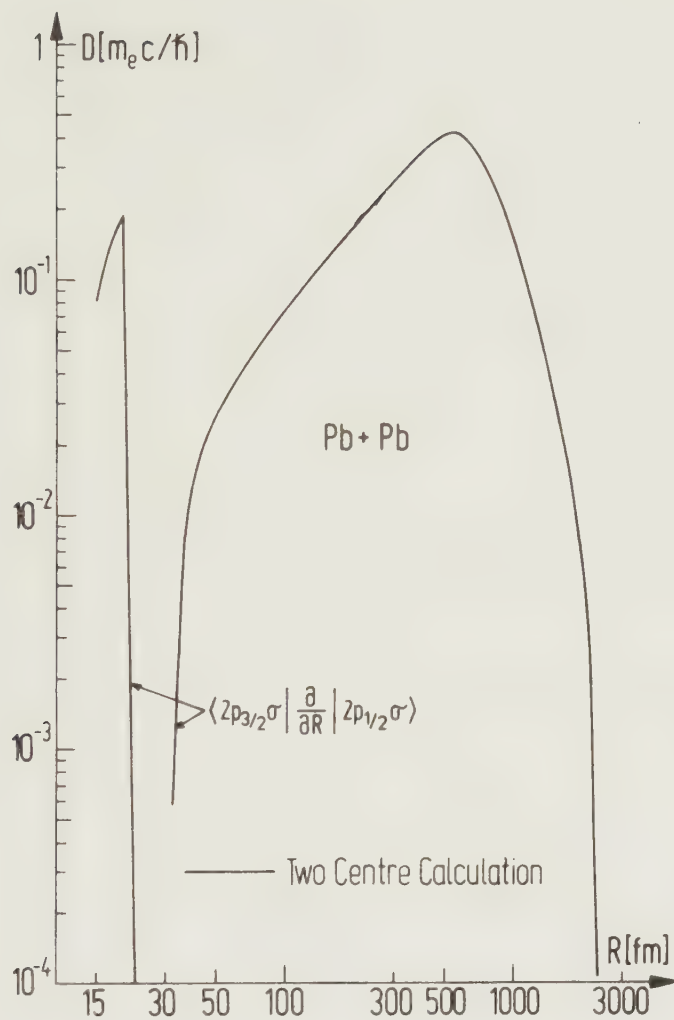


Bild 85: Abstandsabhängigkeit des radialen Matrixelements
des Pb-Pb-Quasimoleküls

Bei $R \sim 500 \text{ fm}$ ist die radiale Kopplung zwischen dem $2p_{\frac{3}{2}}^{\frac{3}{2}}$ und dem $2p_{\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}$ Zustand sehr stark. Zusammen mit der Rotationskopplung zwischen den $2p_{\frac{3}{2}}^{\frac{3}{2}}$ - $2p_{\frac{3}{2}}^{\frac{3}{2}}$ Zuständen ($R \rightarrow 0$) führt das Matrixelement $\langle 2p_{\frac{3}{2}}^{\frac{3}{2}} | \frac{\partial}{\partial R} | 2p_{\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \rangle$ in den theoretischen Rechnungen⁵⁵ zu einer Anhebung der $2p_{\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}$ Ionisation am Beispiel des Pb-Pb-Quasimoleküls, die durch die Monopolrechnungen nicht nachvollzogen werden können.

VII.2 Die Rotationsmatrixelemente der Quasimoleküle

In den gekoppelten Kanalgleichungen der Besetzungsamplitude (2) läßt sich der $\frac{\partial}{\partial t}$ Operator in einen radialen- und einen Rotations-Anteil aufspalten. Die Rotationsmatrixelemente werden hervorgerufen durch die intrinsische Rotation der Quasimoleküle mit der Winkelgeschwindigkeit $\vec{\omega} = \omega \vec{e}_x = b \cdot v(\infty) \vec{e}_x / R^2$. Zur Berechnung der Rotationsmatrixelemente führen wir die nicht hermiteschen Operatoren J_+ und J_- ein⁷³, die zusammen den Drehimpulsoperator J_x bilden. Wirkt J_x auf die Wellenfunktion $|j, m\rangle$, so finden wir^{43,50}

$$J_x |j, \mu\rangle = \frac{1}{2} (J_+ + J_-) |j, \mu\rangle = \frac{1}{2} \left([(j-\mu)(j+\mu+1)]^{\frac{1}{2}} |j, \mu+1\rangle + [(j+\mu)(j-\mu+1)]^{\frac{1}{2}} |j, \mu-1\rangle \right), \quad (\text{VII.37})$$

wobei j der Gesamtdrehimpuls und μ die magnetische Quantenzahl ist. Wählen wir als Anfangszustand $|\phi_{i\mu}(\vec{r})\rangle$ Gl.(9) und als Endzustand $\langle\phi_{f\mu}(\vec{r})|$ Gl.(10), so ergibt sich für die Corioliskopplung

$$\begin{aligned} \langle\phi_{f\mu}(\vec{r})| J_x |\phi_{i\mu}(\vec{r})\rangle &= \sum_{\kappa} \frac{1}{2} \left\{ \int_0^{\infty} r^2 dr G_{\mu\kappa}(r) g_{\bar{\mu}\kappa}(r) * \right. \\ &* \left([(j_{\kappa}-\bar{\mu})(j_{\kappa}+\bar{\mu}-1)]^{\frac{1}{2}} \delta_{\mu, \bar{\mu}+1} + [(j_{\kappa}+\bar{\mu})(j_{\kappa}-\bar{\mu}+1)]^{\frac{1}{2}} \delta_{\mu, \bar{\mu}-1} \right) \\ &+ \int_0^{\infty} r^2 dr F_{\mu\kappa}(r) f_{\bar{\mu}\kappa}(r) \left([(j_{\kappa}-\mu)(j_{\kappa}+\bar{\mu}+1)]^{\frac{1}{2}} \delta_{\mu, \mu+1} + \right. \\ &+ \left. [(j_{\kappa}+\bar{\mu})(j_{\kappa}-\bar{\mu}+1)]^{\frac{1}{2}} \delta_{\mu, \mu-1} \right) \Big\}. \end{aligned} \quad (\text{VII.38})$$

Werden bei den Rotationsmatrixelementen die Anfangs- und Endzustände vertauscht, so gilt die Beziehung ($\mu=|\mu|$)

$$\langle \phi_{f-\mu}(\vec{r}) | J_x | \phi_{i\mu}(\vec{r}) \rangle = \langle \phi_{i-\mu}(\vec{r}) | J_x | \phi_{f\mu}(\vec{r}) \rangle \quad (\text{VII.39})$$

Vertauschen wir nur die Vorzeichen der magnetischen Quantenzahl, so finden wir

$$\langle \phi_{f-\mu}(\vec{r}) | J_x | \phi_{i\mu}(\vec{r}) \rangle = - \langle \phi_{f\mu}(\vec{r}) | J_x | \phi_{i-\mu}(\vec{r}) \rangle, \quad (\text{VII.40})$$

d.h., wir brauchen die Rotationsmatrixelemente nur für eine Kombination der Zustände zu berechnen. Alle anderen Möglichkeiten lassen sich aus den Gleichungen (39) und (40) bestimmen.

Die Rotationsmatrixelemente der im folgenden Abschnitt diskutierten Zweizentrensysteme wurden nach der Gleichung (38) berechnet. Mit Ausnahme des Nb-Nb-Systems (14 Zustände) haben wir für alle untersuchten Quasimoleküle jeweils 21 Zustände berechnet (siehe Kapitel VII.1.d). Die Rotationskopplung wirkt nur zwischen Zuständen, deren magnetische Quantenzahlen sich um ± 1 unterscheiden. Haben die Energieniveaus des Anfangs- und Endzustandes in der Asymptotik $R \rightarrow 0$ denselben Gesamtdrehimpuls j und den gleichen Bahndrehimpuls l , so sind die Rotationsmatrixelemente der Quasimoleküle für $R \rightarrow 0$ ungleich Null und wir finden für die Zweizentrenmatrixelemente des vereinigten Systems folgende Werte (n =Hauptquantenzahl).

Tabelle 16: Die Rotationsmatrixelemente, die in der Asymptotik $R \rightarrow 0$ ungleich Null sind.

$$\langle ns \frac{1}{2} -\sigma | J_x | ns \frac{1}{2} \sigma \rangle = 0,5 \hbar$$

$$\langle np \frac{1}{2} -\sigma | J_x | np \frac{1}{2} \sigma \rangle = 0,5 \hbar$$

$$\langle np \frac{3}{2} -\sigma | J_x | np \frac{3}{2} \sigma \rangle = 1,0 \hbar$$

$$\langle np \frac{3}{2} \pi | J_x | np \frac{3}{2} \sigma \rangle = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar \sim 0,866 \hbar$$

$$\langle nd \frac{3}{2} -\sigma | J_x | nd \frac{3}{2} \sigma \rangle = 1,0 \hbar$$

$$\langle nd \frac{3}{2} \pi | J_x | nd \frac{3}{2} \sigma \rangle = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$$

$$\langle nd \frac{5}{2} -\sigma | J_x | nd \frac{5}{2} \sigma \rangle = 1,5 \hbar$$

$$\langle nd \frac{5}{2} \pi | J_x | nd \frac{5}{2} \sigma \rangle = \frac{\sqrt{8}}{2} \hbar \sim 1,414 \hbar$$

$$\langle nd \frac{5}{2} \delta | J_x | nd \frac{5}{2} \pi \rangle = \frac{\sqrt{5}}{2} \hbar \sim 1,118 \hbar.$$

Alle anderen Rotationskopplungen sind Null. Diese Resultate stimmen mit den Einzentrenwerten überein⁷³.

Wie wir im nächsten Kapitel sehen werden, beeinflussen nur die Rotationsmatrixelemente der Tabelle 16 die dynamischen Rechnungen der K-Schalenionisation, molekulare Röntgenspektren usw. Für die asymmetrischen Quasimoleküle (21 Zustände) haben wir unter Ausnutzung der Beziehungen (39, 40) jeweils 203 Rotationsmatrixelemente in Abhängig-

keit vom Zweizentrenabstand berechnet. Da die Parität in symmetrischen Systemen eine "gute" Quantenzahl ist, ergeben sich hieraus nur 107 erlaubte Rotationskopplungen.

Am Beispiel des U-Cm Quasimoleküls zeigen wir die interessantesten Matrixelemente, die ab einem beliebigen internuklearen Abstand $R \gg 0$ größer als 0,01 Å werden (Bilder 86-103). Die J_x -Matrixelemente des Pb-Cm-Systems haben in etwa die gleiche Struktur (in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand R) wie im U-Cm-System. Deshalb haben wir in den Bildern 104-111 für das Pb-Cm-Quasimolekül nur die wichtigsten Rotationsmatrixelemente abgebildet. Die nichtrelativistischen Rotationsmatrixelemente des Nb-Nb-Systems sind in den Bildern 112-115 dargestellt.

Analog zu den radialen Matrixelementen sind die Spitzen der J_x -Kopplungen eine Folge der verbotenen Niveaure Kreuzungen, an denen ein oder beide Zustände des Matrixelementes beteiligt sind (siehe Kapitel III.2).

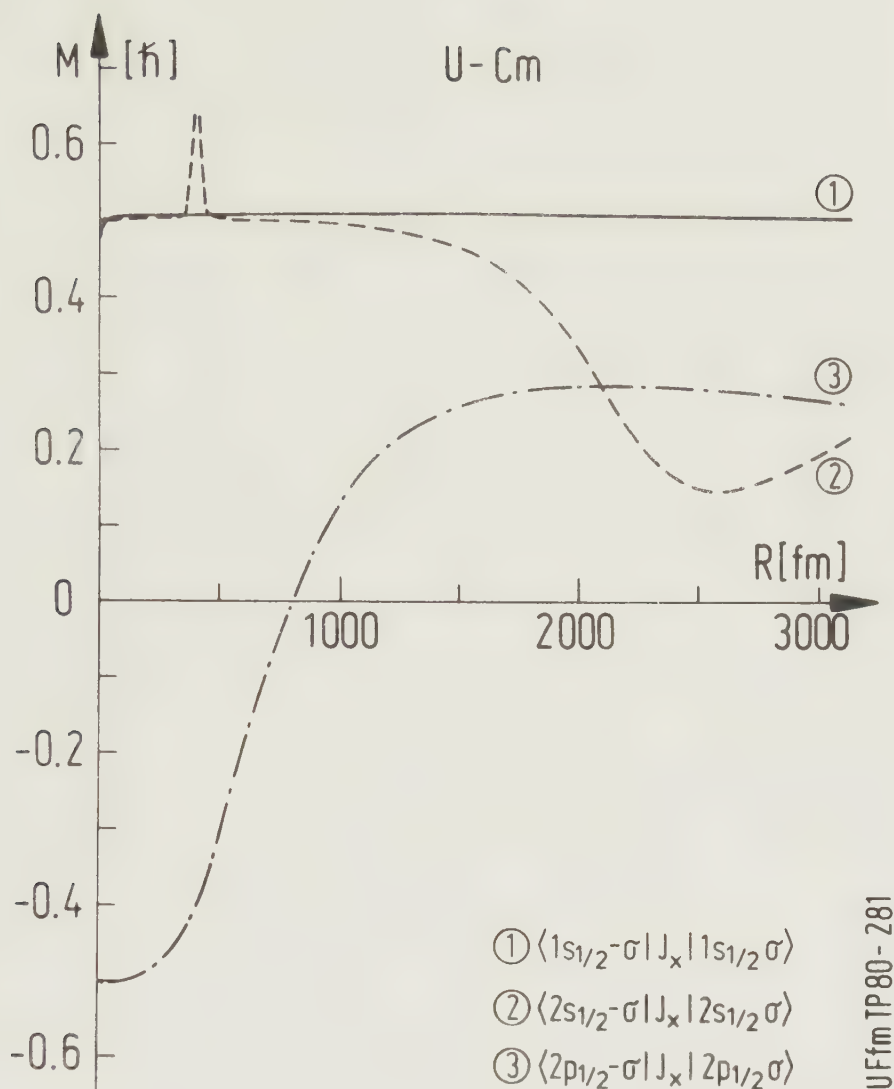


Bild 86: Die Rotationsmatrixelemente des U-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer Maßstab).

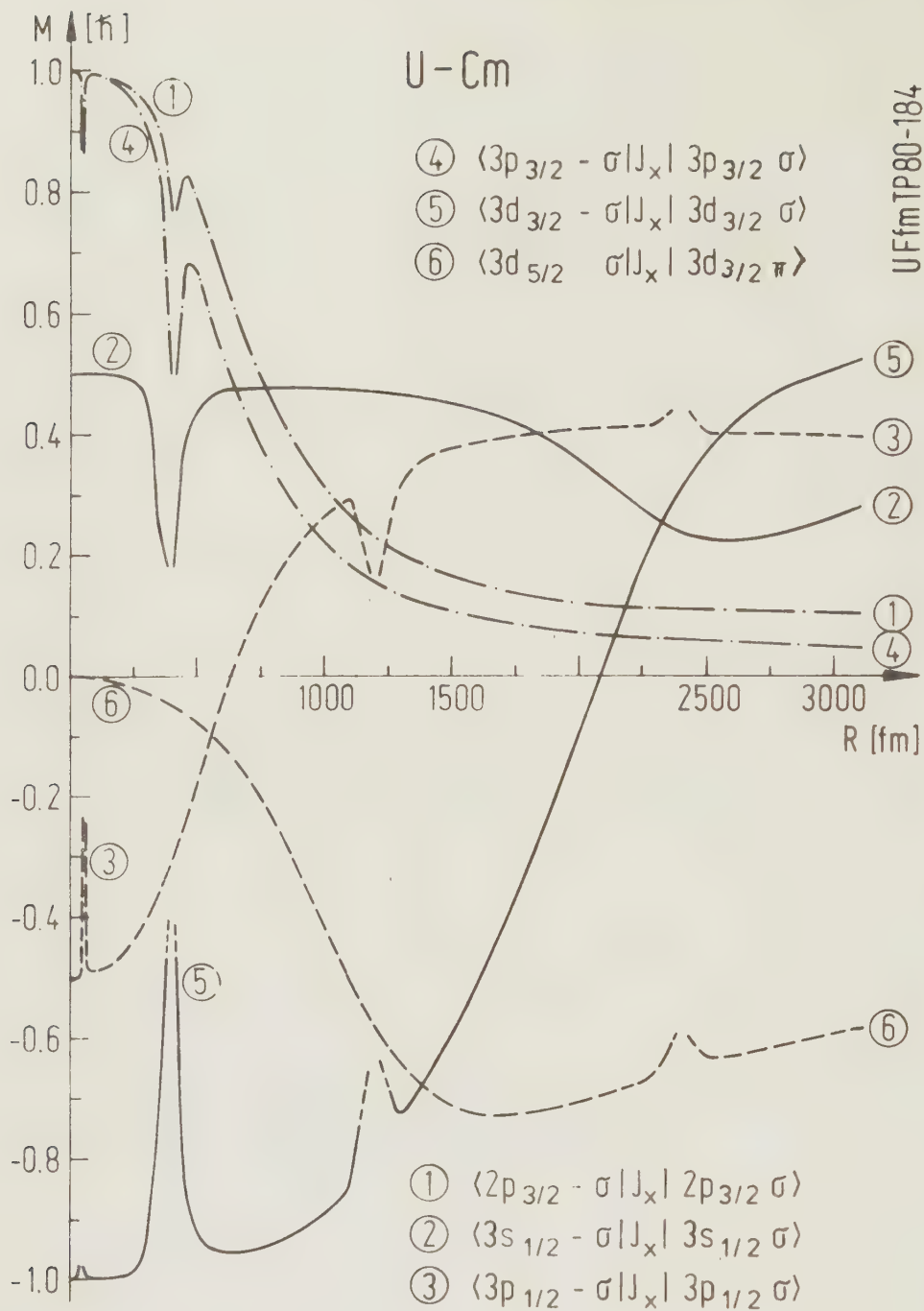


Bild 87: Die Rotationsmatrixelemente des U-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer Maßstab).

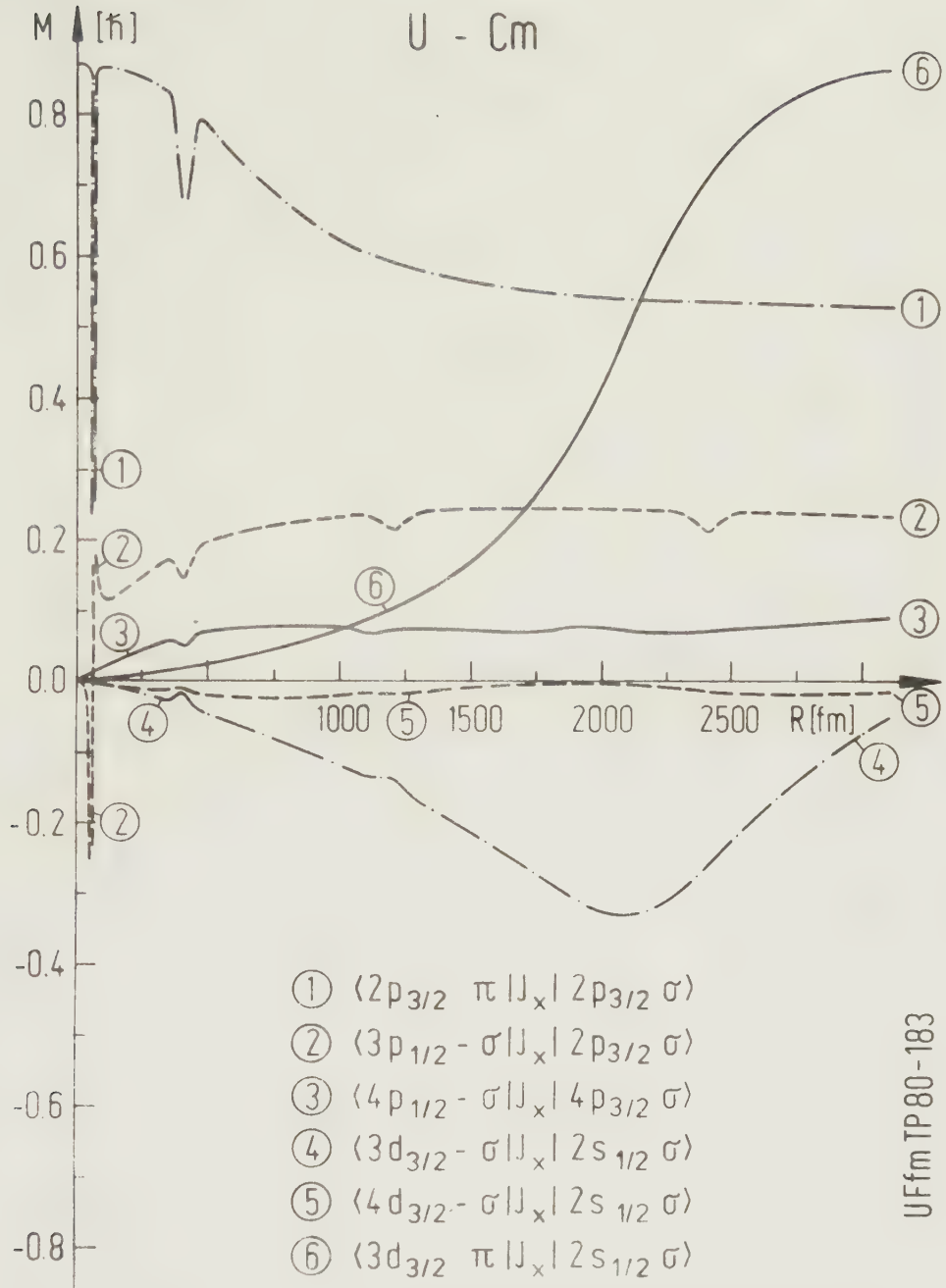


Bild 88: Die Rotationsmatrixelemente des U-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer Maßstab).

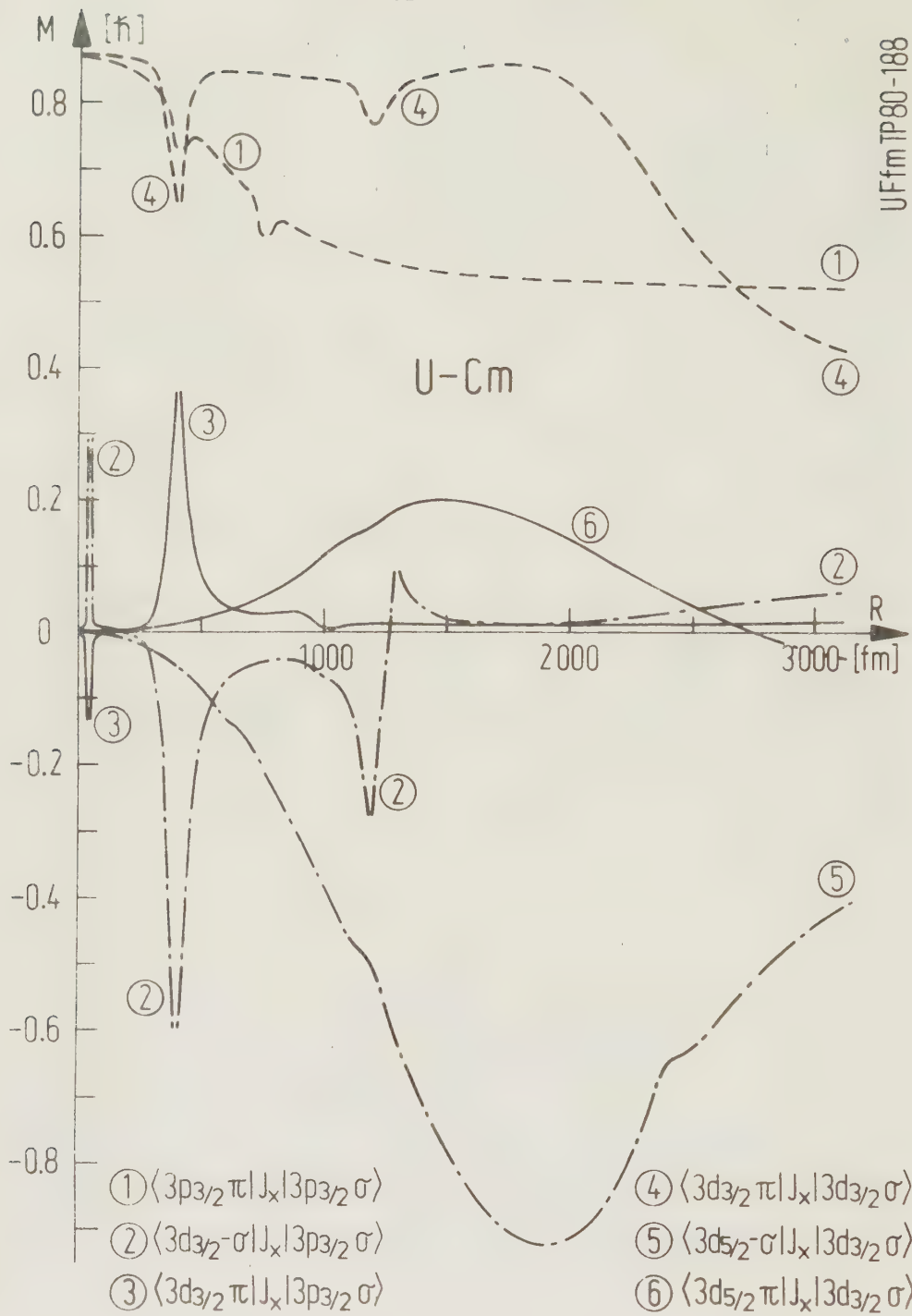


Bild 89: Die Rotationsmatrixelemente des U-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer Maßstab).

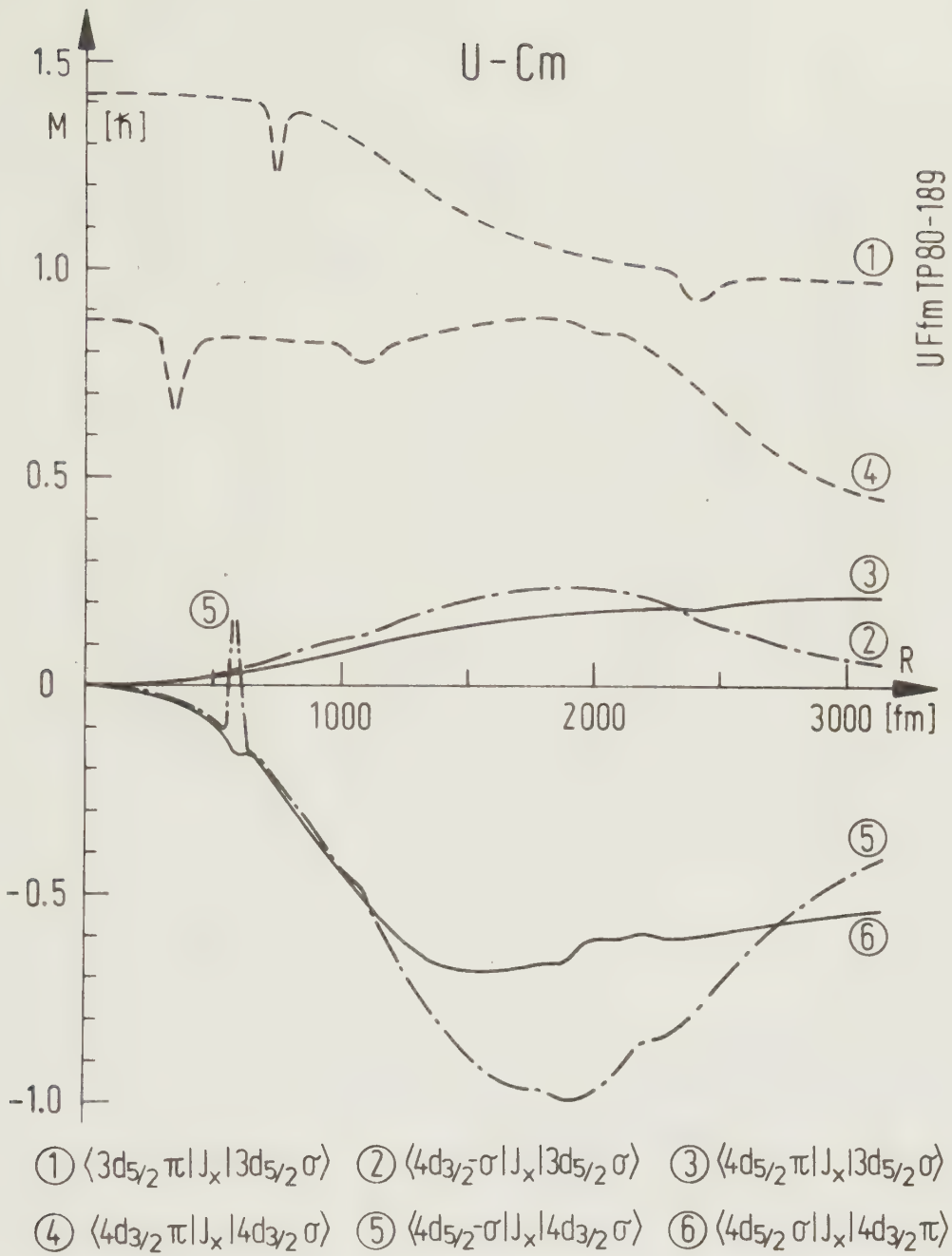


Bild 90: Die Rotationsmatrixelemente des U-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer Maßstab).

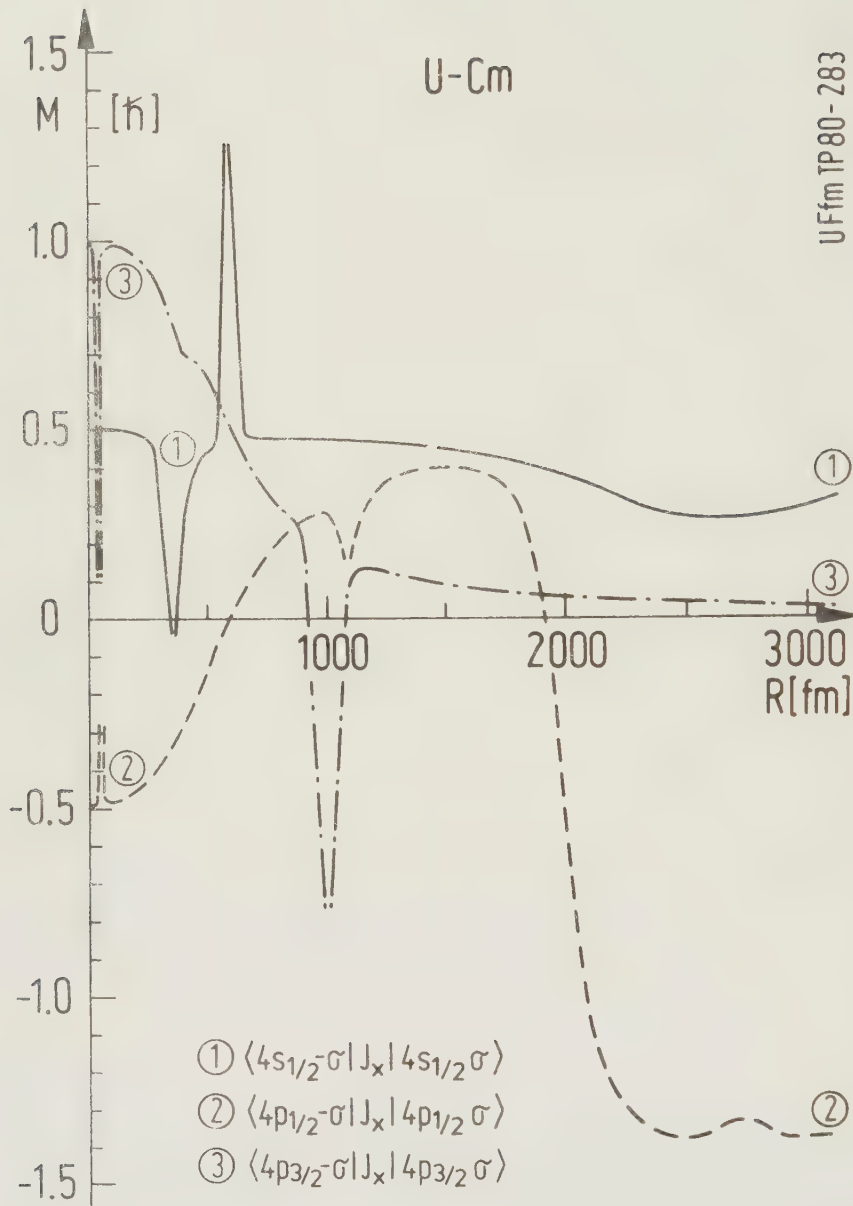


Bild 91: Die Rotationsmatrixelemente des U-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer Maßstab).

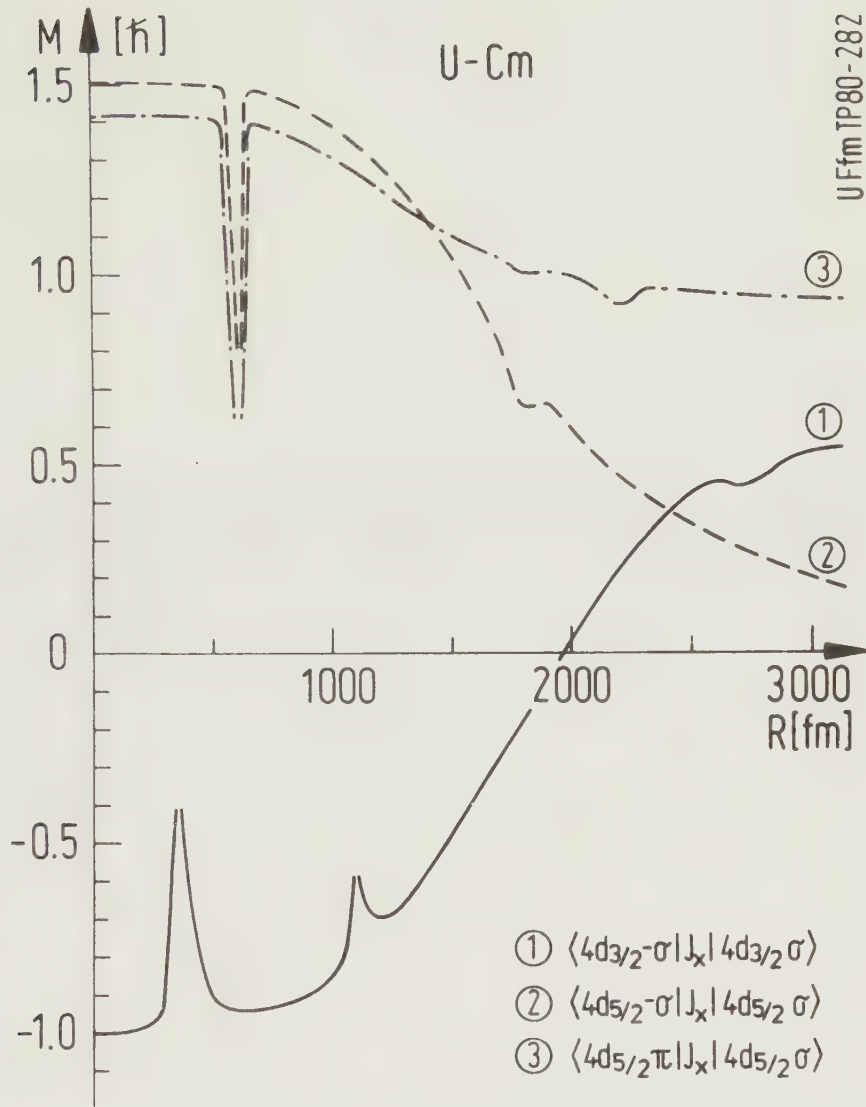
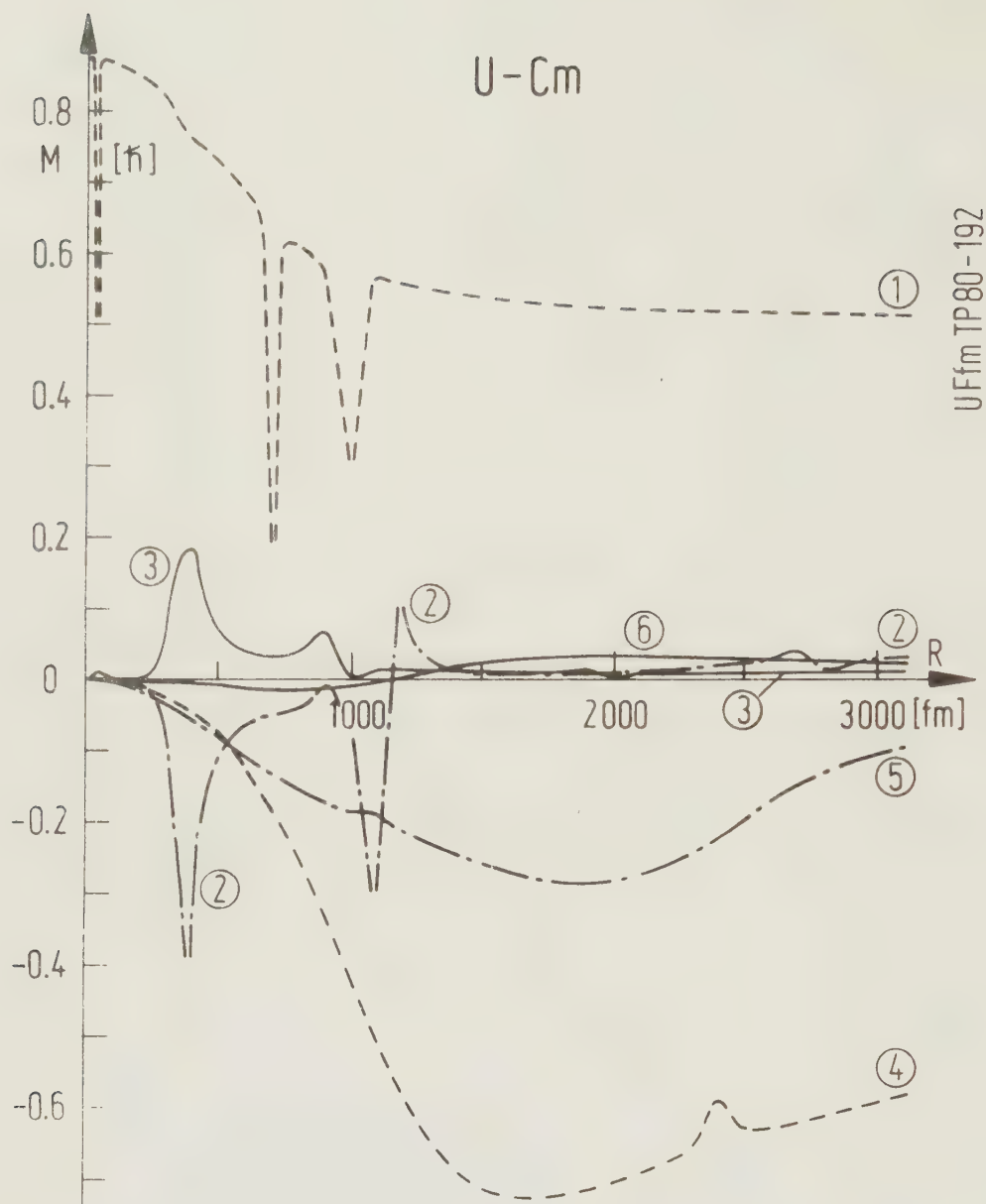


Bild 92: Die Rotationsmatrixelemente des U-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer Maßstab).



- ① $\langle 4p_{3/2} \pi | J_x | 4p_{3/2} \sigma \rangle$ ② $\langle 4d_{3/2} \sigma | J_x | 4p_{3/2} \sigma \rangle$ ③ $\langle 4d_{3/2} \pi | J_x | 4p_{3/2} \sigma \rangle$
 ④ $\langle 3d_{5/2} \sigma | J_x | 3d_{3/2} \pi \rangle$ ⑤ $\langle 4d_{3/2} \sigma | J_x | 3d_{3/2} \pi \rangle$ ⑥ $\langle 4d_{5/2} \sigma | J_x | 3d_{3/2} \pi \rangle$

Bild 93: Die Rotationsmatrixelemente des U-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer Maßstab).

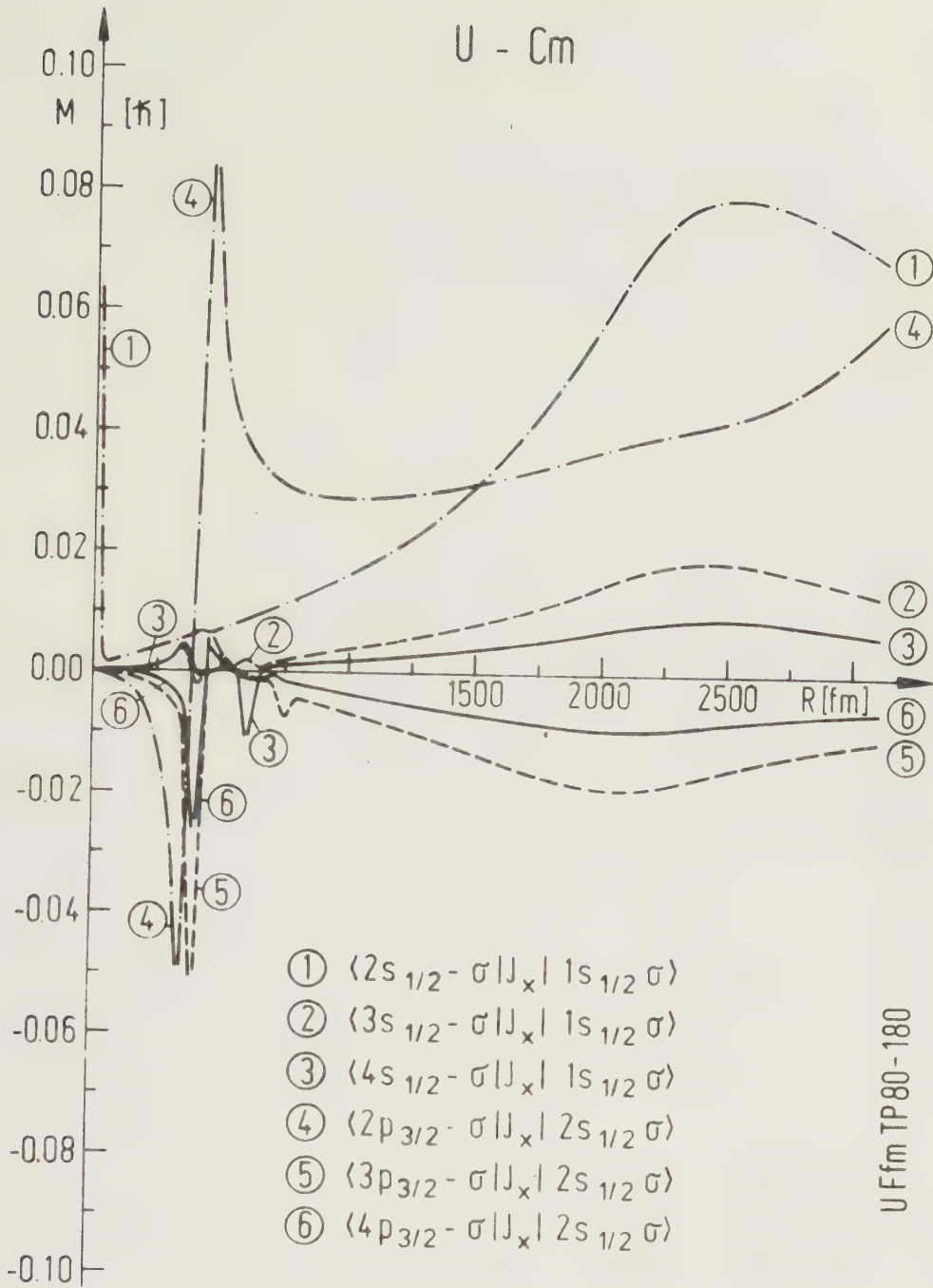


Bild 94: Die Rotationsmatrixelemente des U-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer Maßstab).

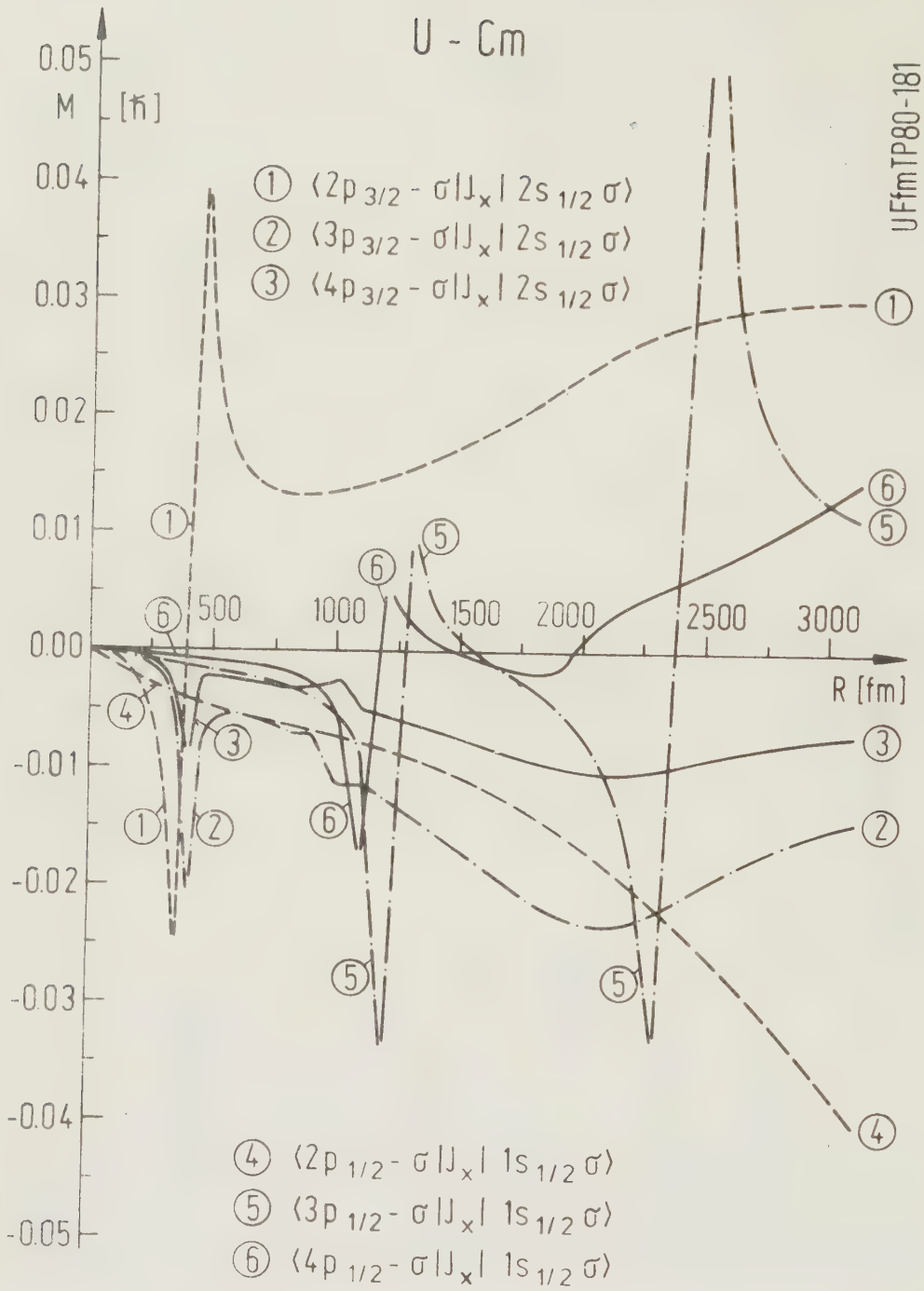


Bild 95: Die Rotationsmatrixelemente des U-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer Maßstab).

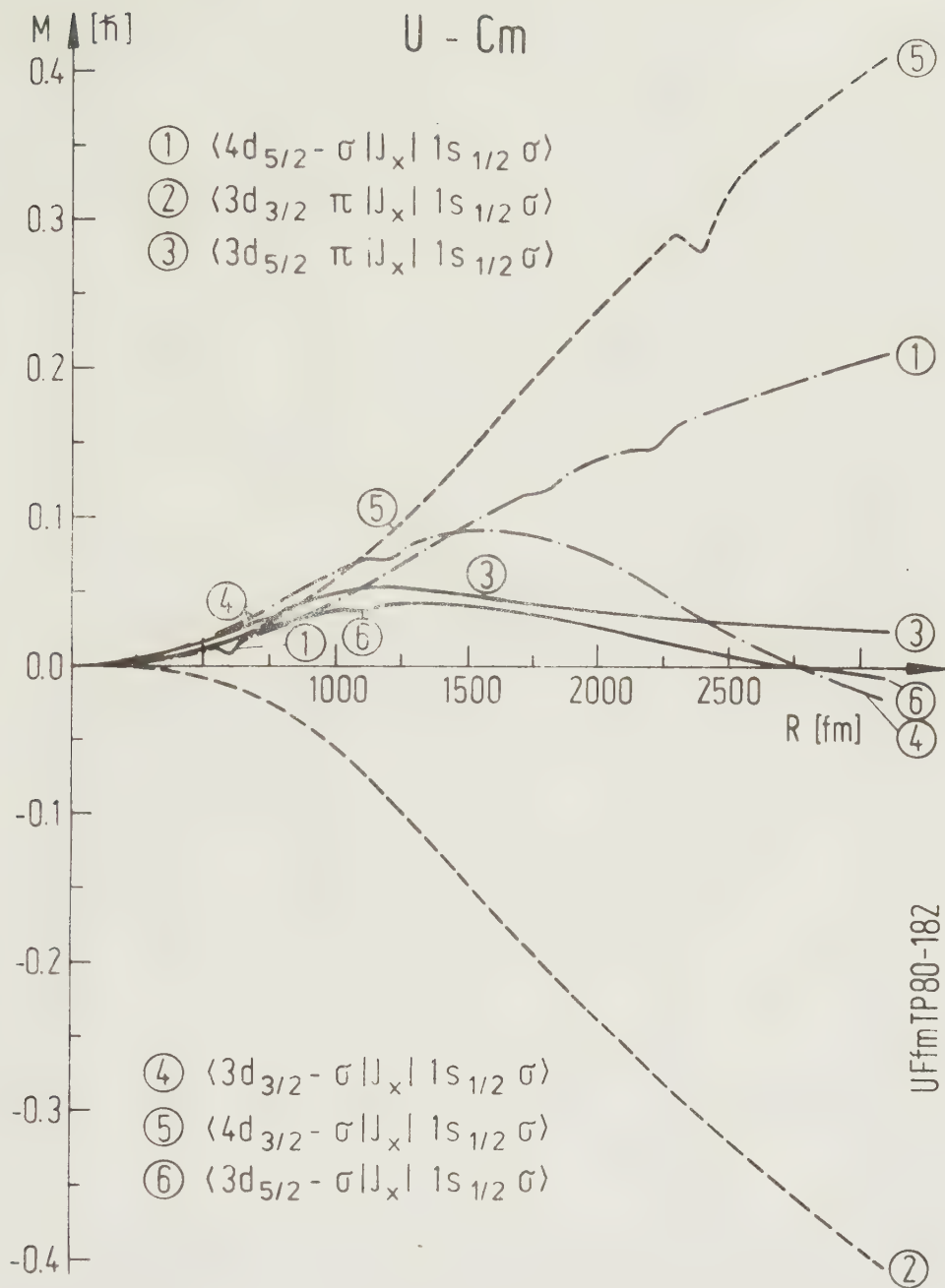
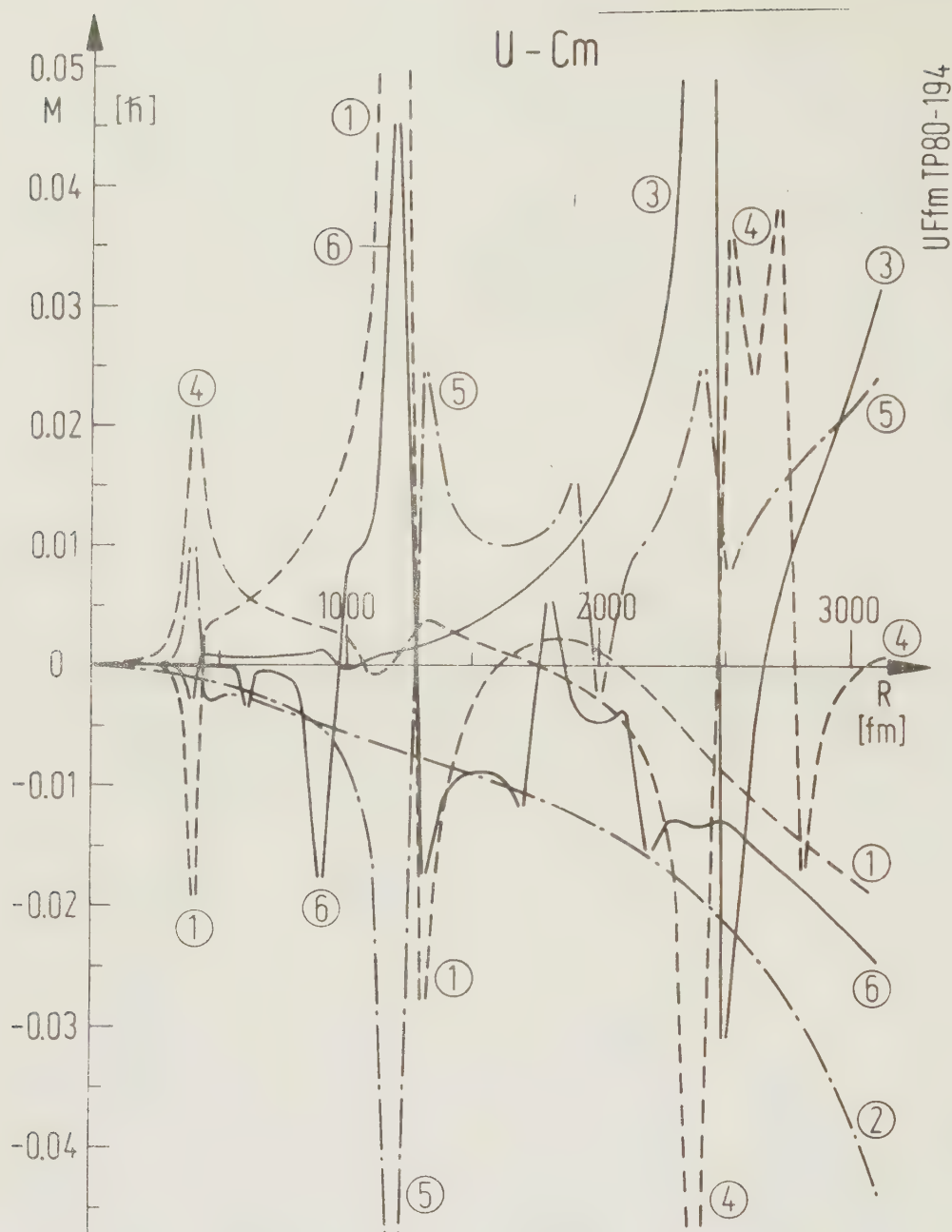
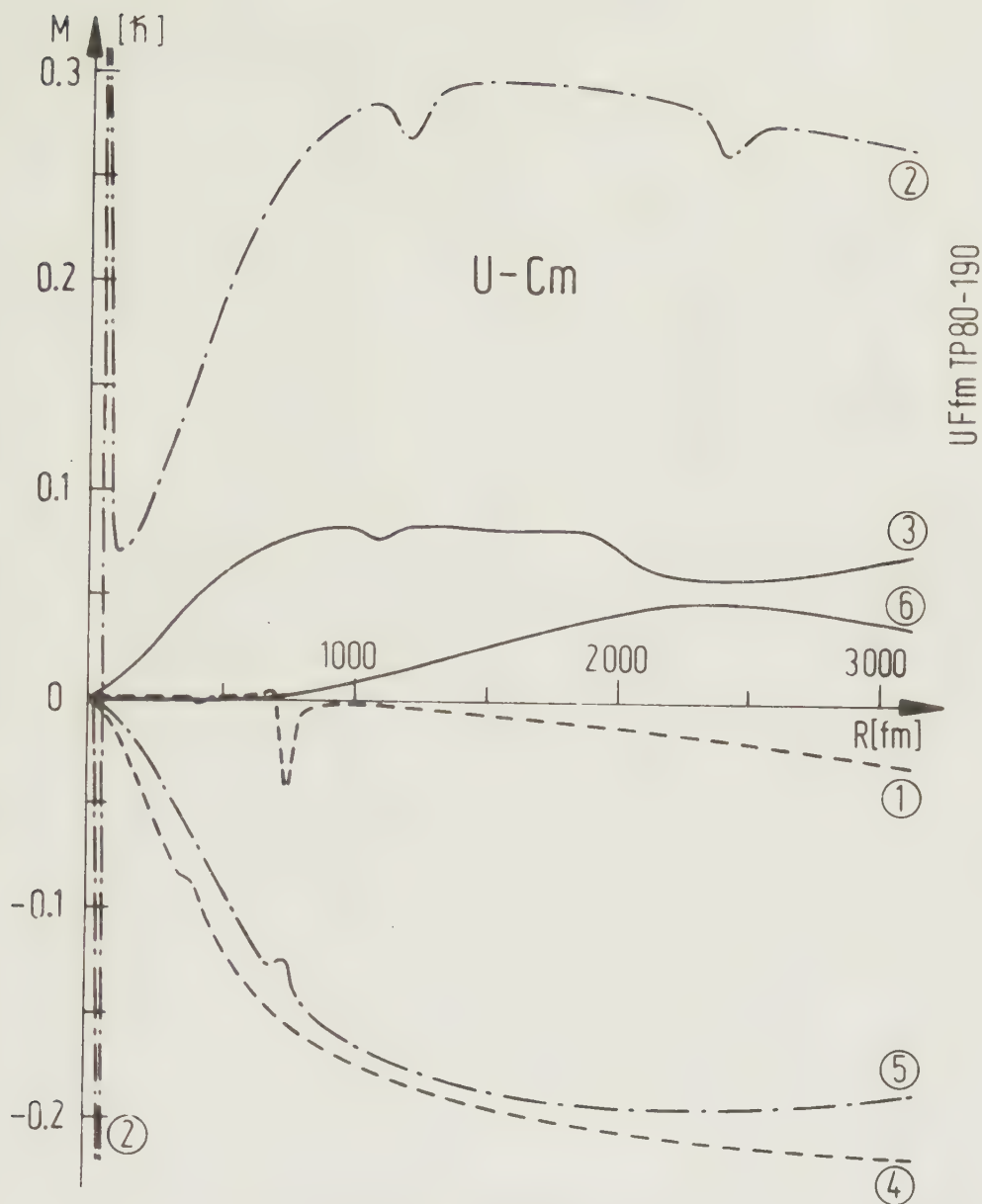


Bild 96: Die Rotationsmatrixelemente des U-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer Maßstab).



- ① $\langle 3d_{3/2}\sigma | J_x | 2p_{1/2}\sigma \rangle$ ② $\langle 3d_{3/2}\pi | J_x | 2p_{1/2}\sigma \rangle$ ③ $\langle 3d_{5/2}\sigma | J_x | 2p_{1/2}\sigma \rangle$
 ④ $\langle 4d_{3/2}\sigma | J_x | 3p_{1/2}\sigma \rangle$ ⑤ $\langle 4d_{3/2}\pi | J_x | 3p_{1/2}\sigma \rangle$ ⑥ $\langle 4d_{5/2}\sigma | J_x | 3p_{1/2}\sigma \rangle$

Bild 97: Die Rotationsmatrixelemente des U-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer Maßstab).



- ① $\langle 3d_{5/2} \pi | J_x | 2p_{1/2} \sigma \rangle$ ② $\langle 3p_{1/2} \sigma | J_x | 2p_{3/2} \pi \rangle$ ③ $\langle 4p_{1/2} \sigma | J_x | 2p_{3/2} \pi \rangle$
 ④ $\langle 3p_{3/2} \sigma | J_x | 2p_{1/2} \sigma \rangle$ ⑤ $\langle 3p_{3/2} \pi | J_x | 2p_{1/2} \sigma \rangle$ ⑥ $\langle 4d_{5/2} \pi | J_x | 2s_{1/2} \sigma \rangle$

Bild 98: Die Rotationsmatrixelemente des U-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer Maßstab).

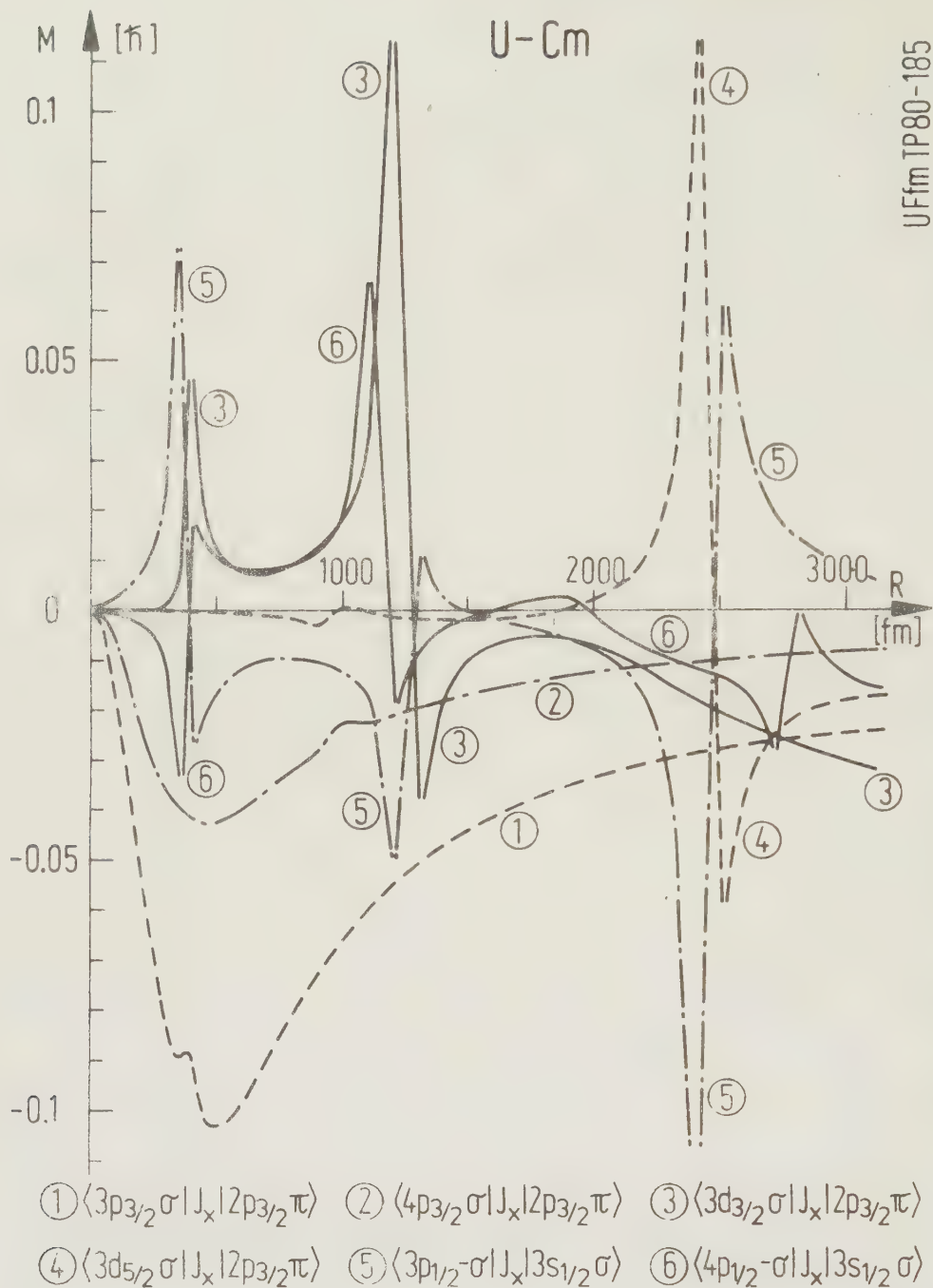
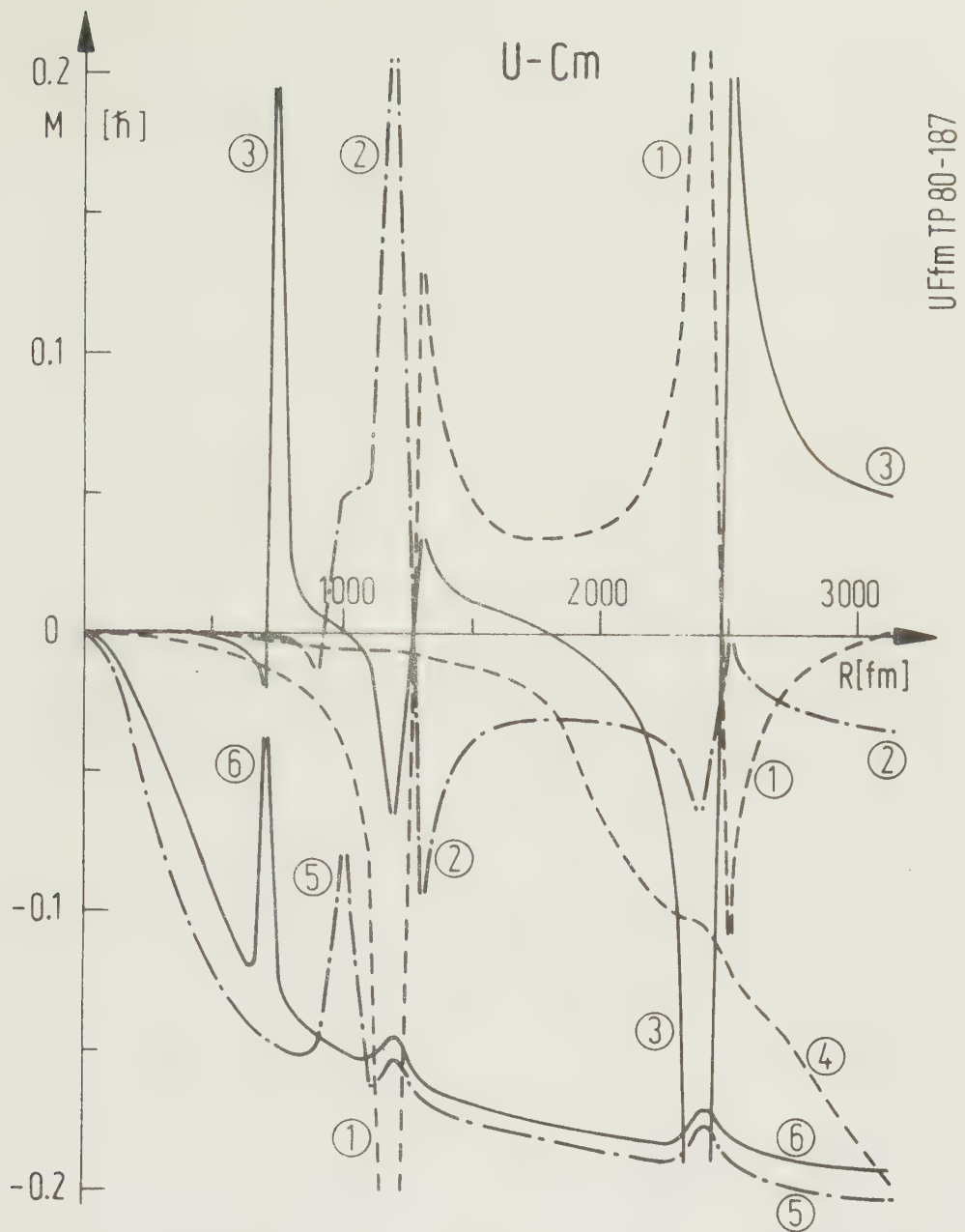
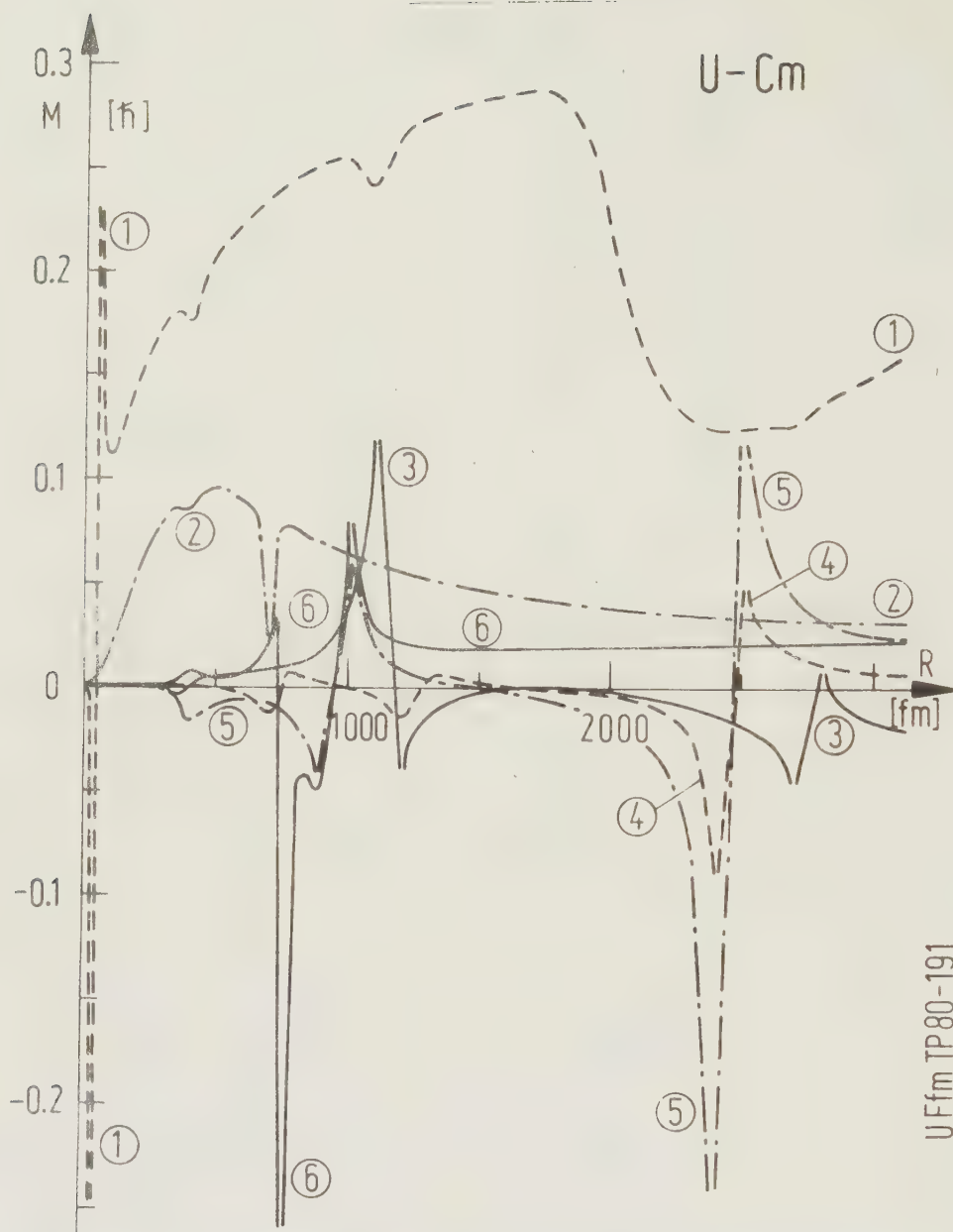


Bild 99: Die Rotationsmatrixelemente des U-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer Maßstab).



- ① $\langle 3d_{3/2} \pi | J_x | 3p_{1/2} \sigma \rangle$ ② $\langle 3d_{5/2} \sigma | J_x | 3p_{1/2} \sigma \rangle$ ③ $\langle 3d_{5/2} \pi | J_x | 3p_{1/2} \sigma \rangle$
 ④ $\langle 4p_{1/2} \sigma | J_x | 3p_{1/2} \sigma \rangle$ ⑤ $\langle 4p_{3/2} \sigma | J_x | 3p_{1/2} \sigma \rangle$ ⑥ $\langle 4p_{3/2} \pi | J_x | 3p_{1/2} \sigma \rangle$

Bild 100: Die Rotationsmatrixelemente des U-Cm-Quasimoleküls
 in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer
 Maßstab).



UFFm TP80-191

- ① $\langle 4p_{1/2}^{-\sigma} | J_x | 3p_{3/2} \sigma \rangle$ ② $\langle 4p_{3/2} \pi | J_x | 3p_{3/2} \sigma \rangle$ ③ $\langle 4d_{3/2}^{-\sigma} | J_x | 3p_{3/2} \sigma \rangle$
 ④ $\langle 4d_{5/2} \pi | J_x | 3p_{1/2} \sigma \rangle$ ⑤ $\langle 3d_{5/2}^{-\sigma} | J_x | 3p_{3/2} \sigma \rangle$ ⑥ $\langle 3d_{5/2} \pi | J_x | 3p_{3/2} \sigma \rangle$

Bild 101: Die Rotationsmatrixelemente des U-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer Maßstab).

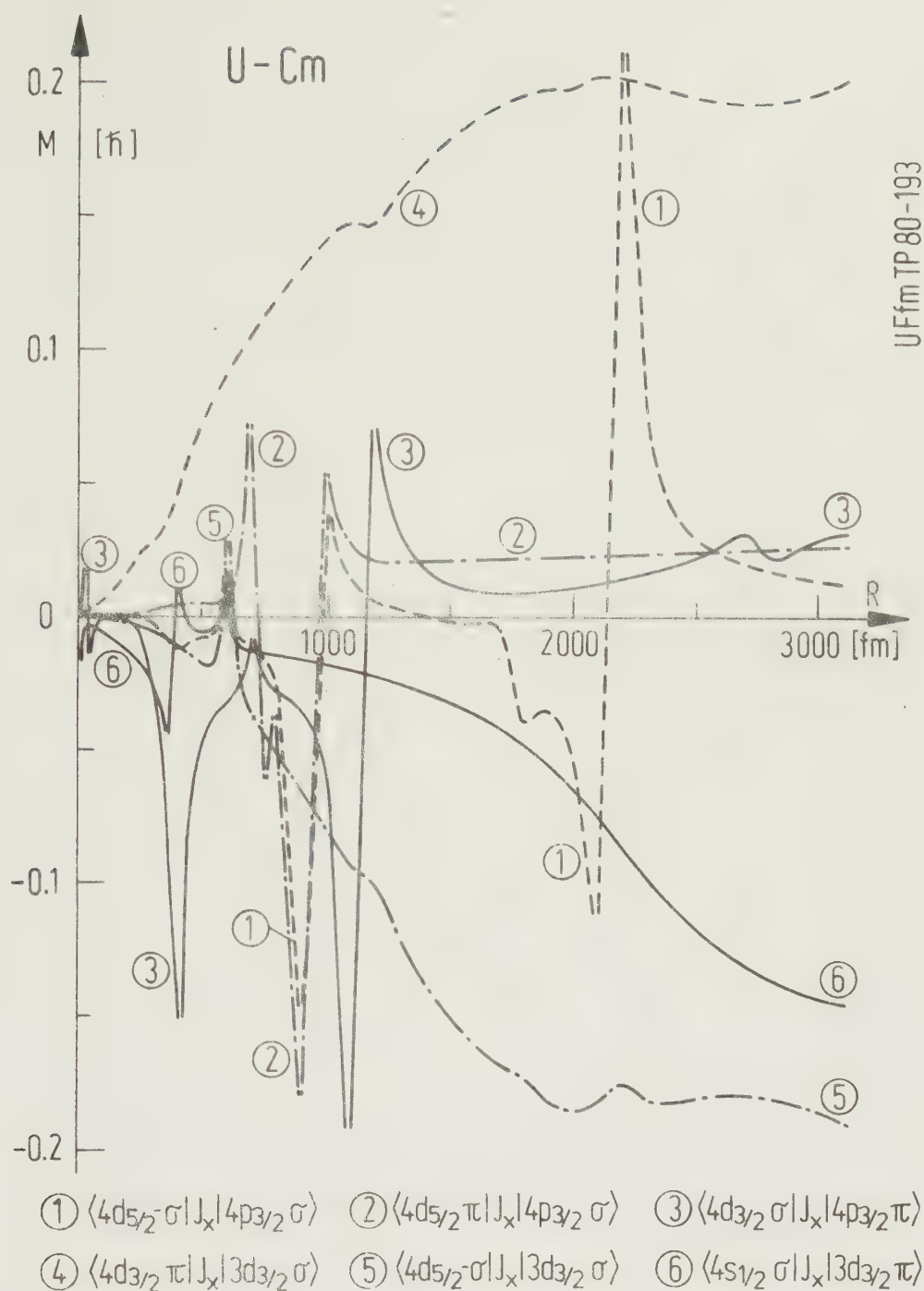


Bild 102: Die Rotationsmatrixelemente des U-Cm-Quasimoleküls
 in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer
 Maßstab).

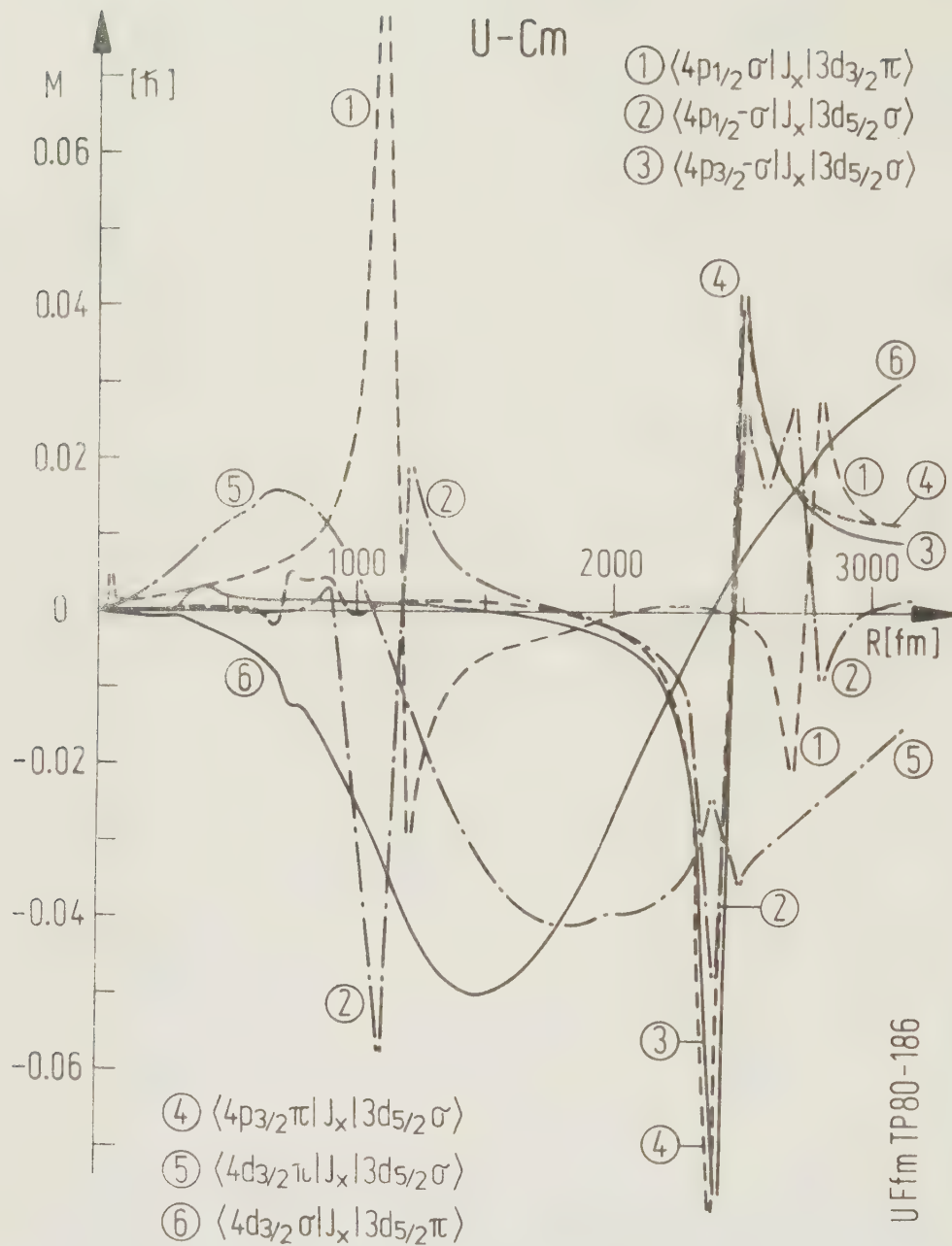


Bild 103: Die Rotationsmatrixelemente des U-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer Maßstab).

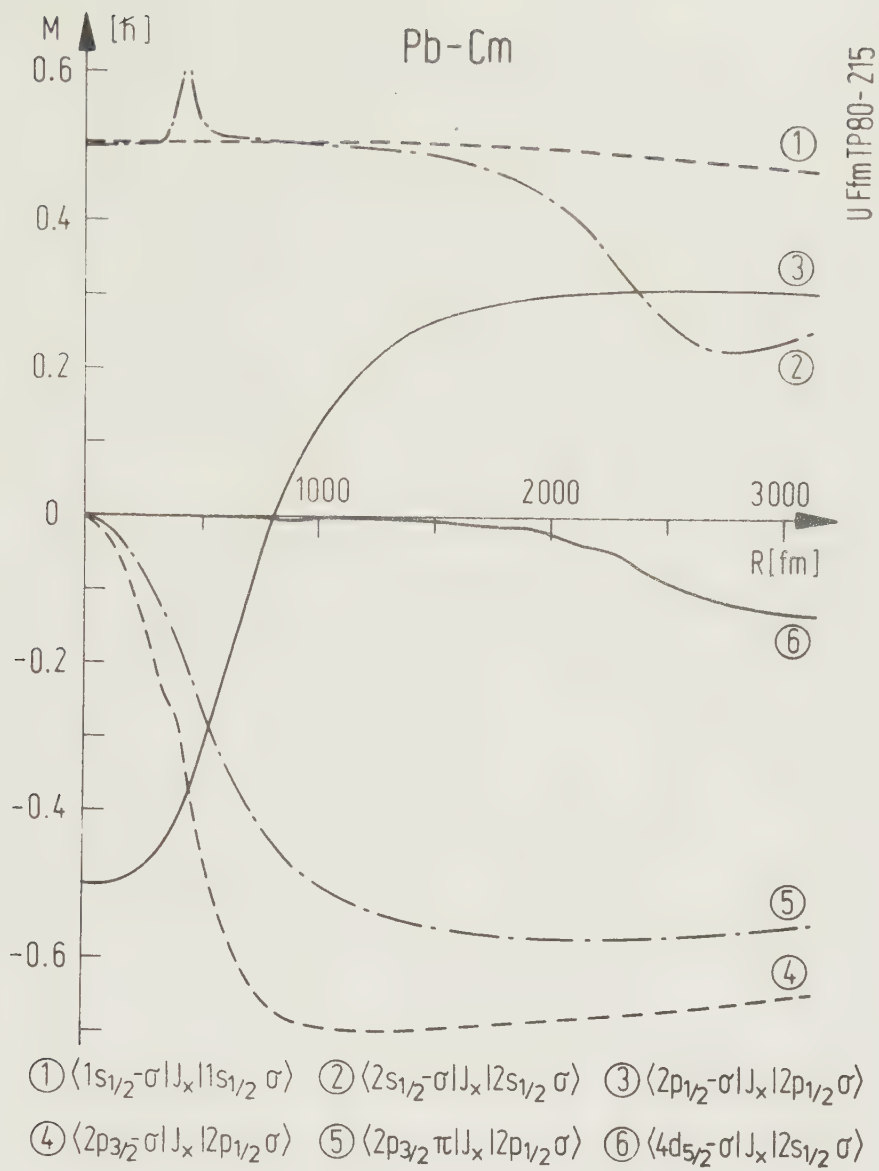


Bild 1o4: Rotationsmatrixelemente des Pb-Cm-Quasimoleküls
in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer
Maßstab).

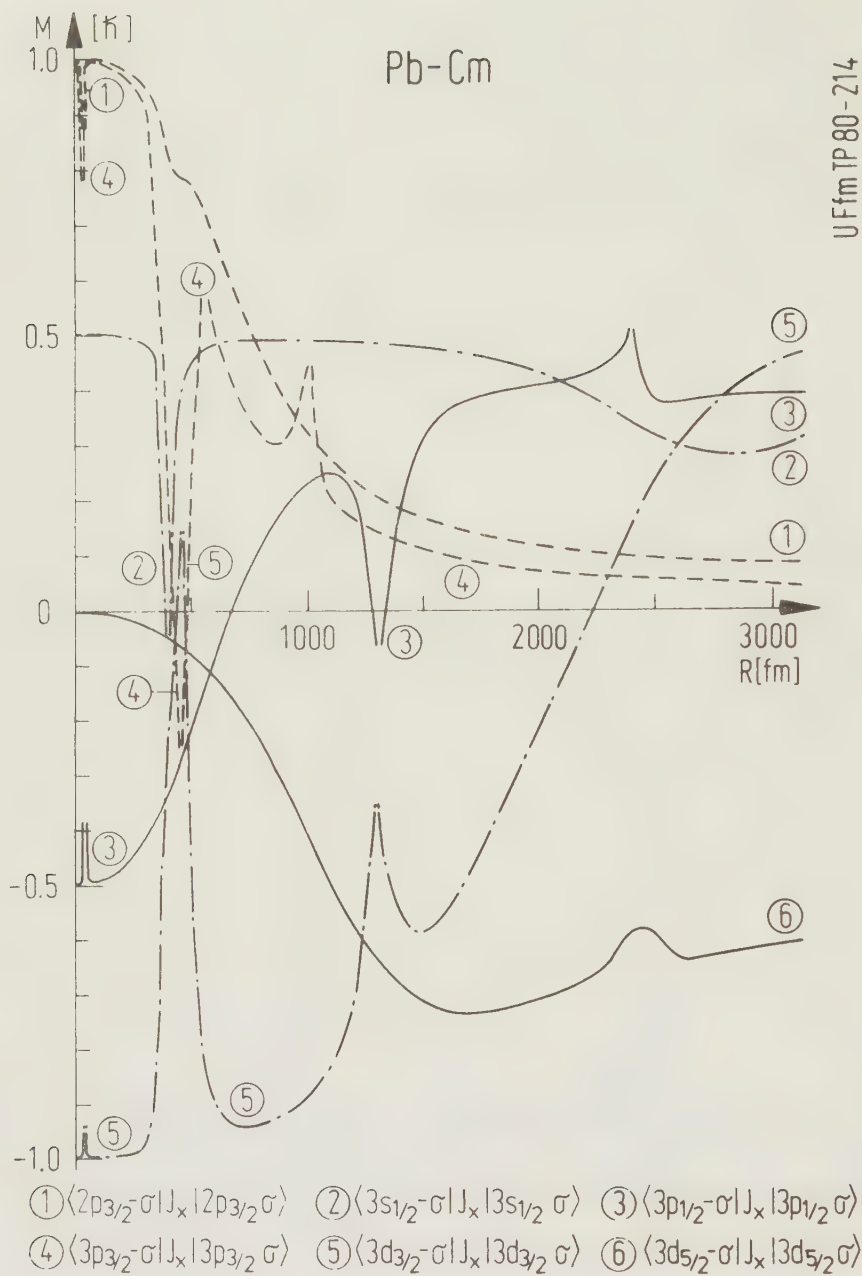


Bild 1o5: Rotationsmatrixelemente des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer Maßstab).

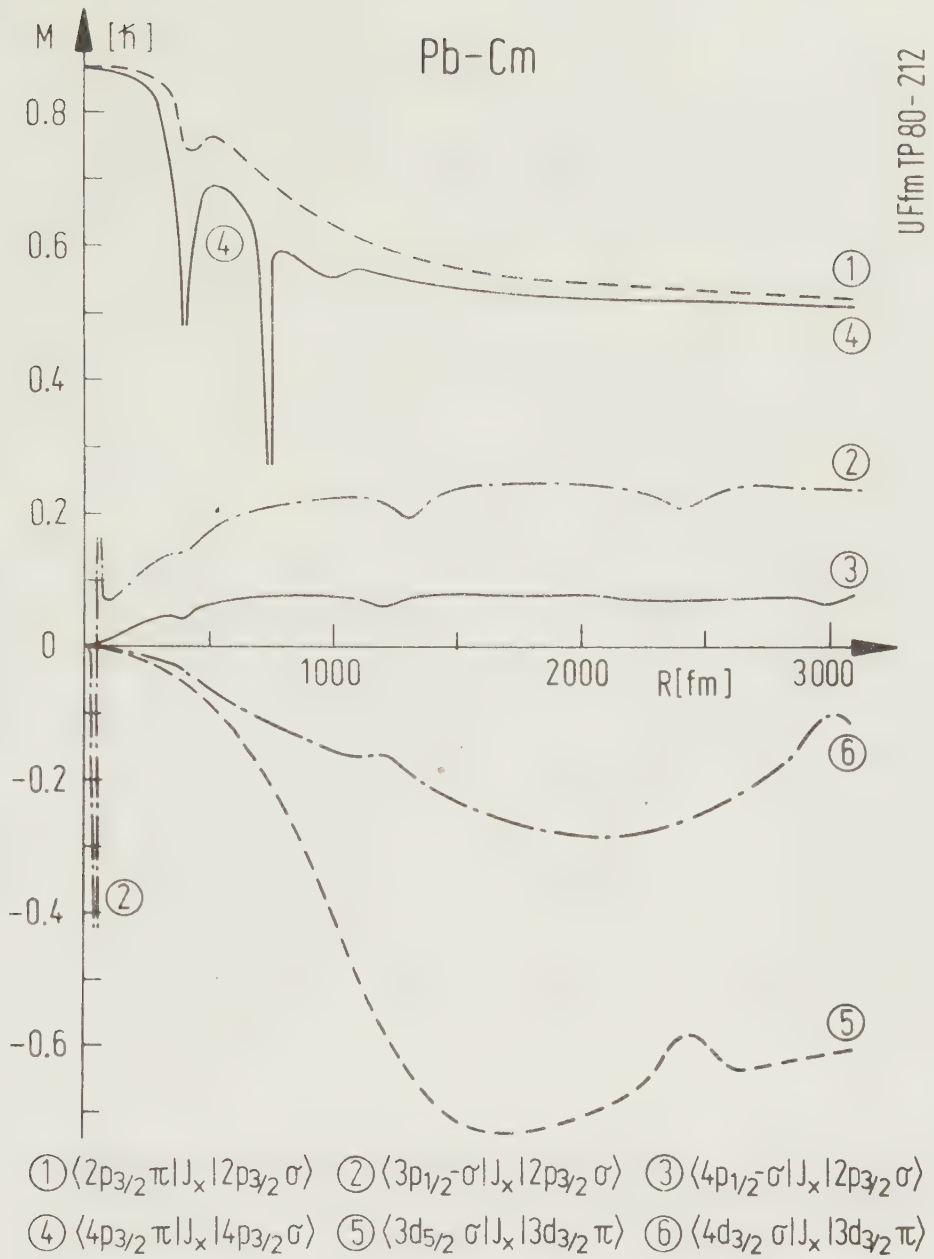


Bild 106: Rotationsmatrixelemente des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer Maßstab).

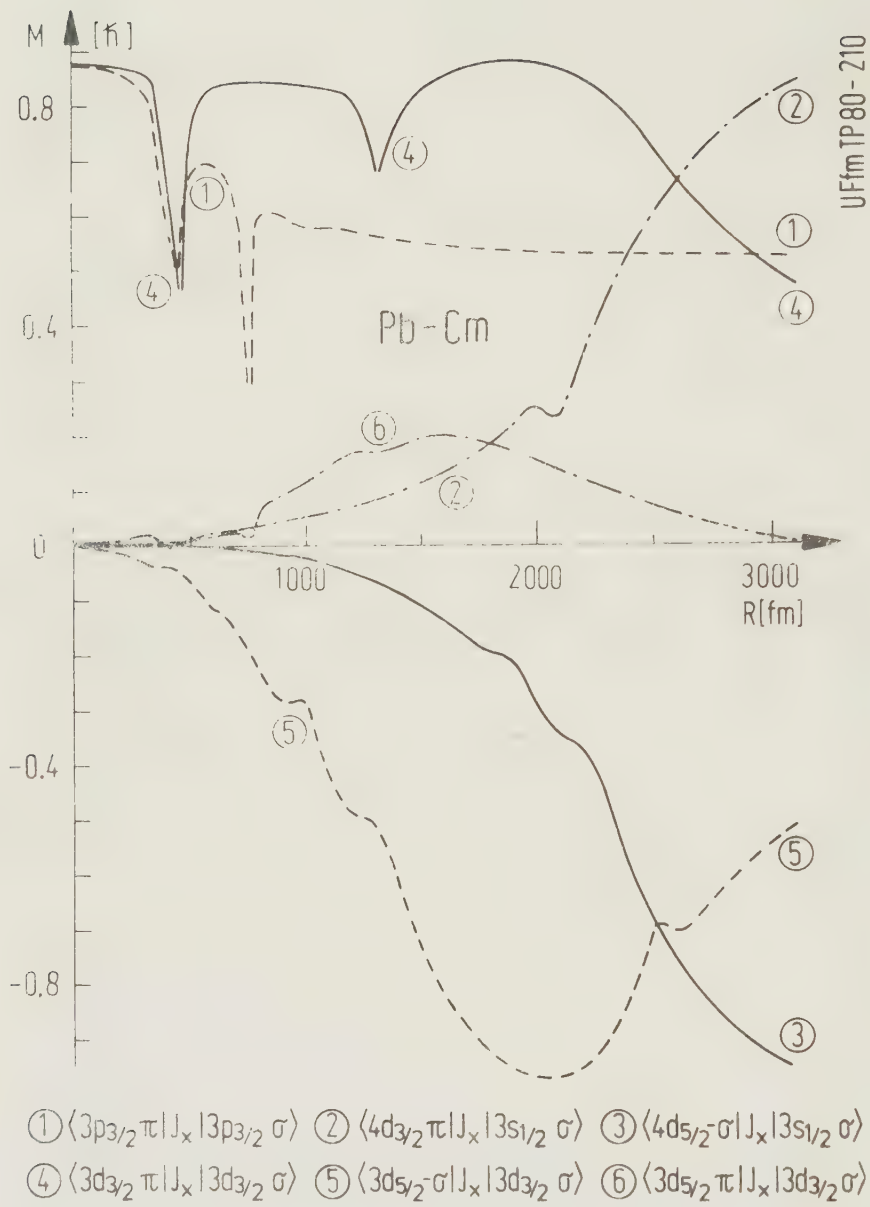


Bild 1o7: Rotationsmatrizelemente des Pb-Cm-Quasimoleküls
 in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer
 Maßstab).

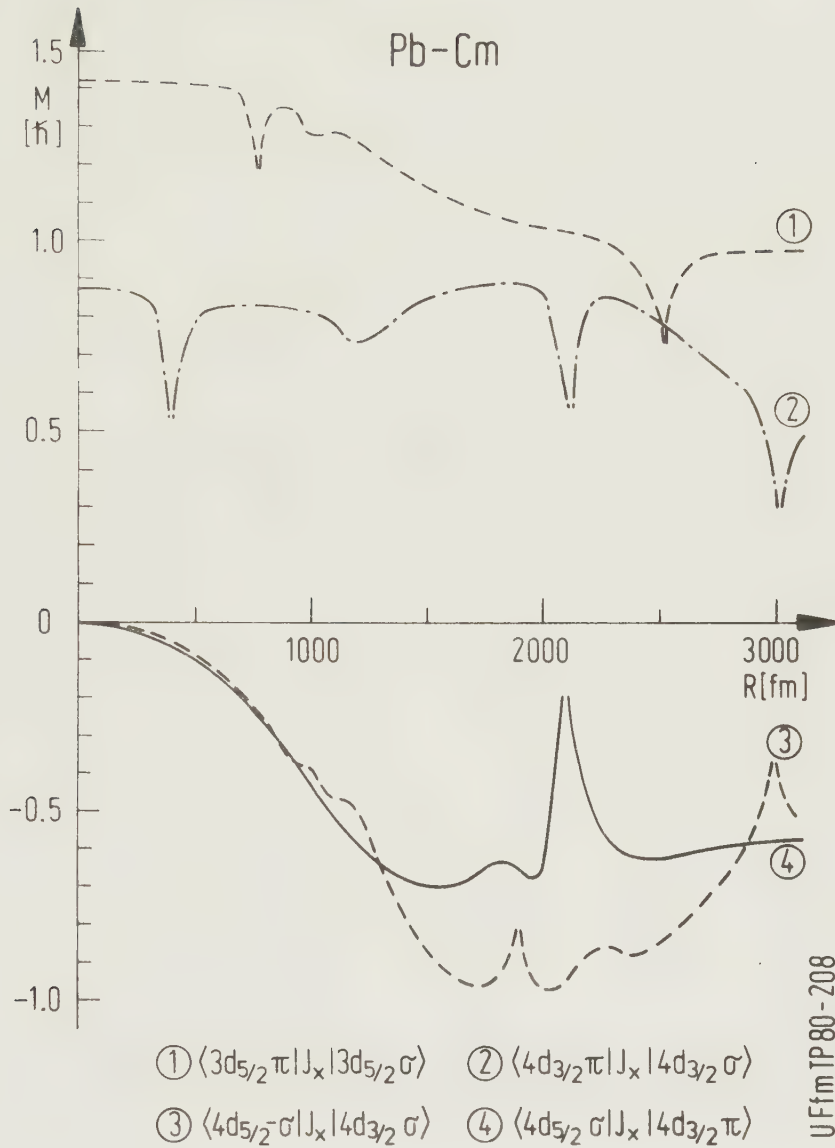


Bild 108: Rotationsmatrixelemente des Pb-Cm-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer Maßstab).

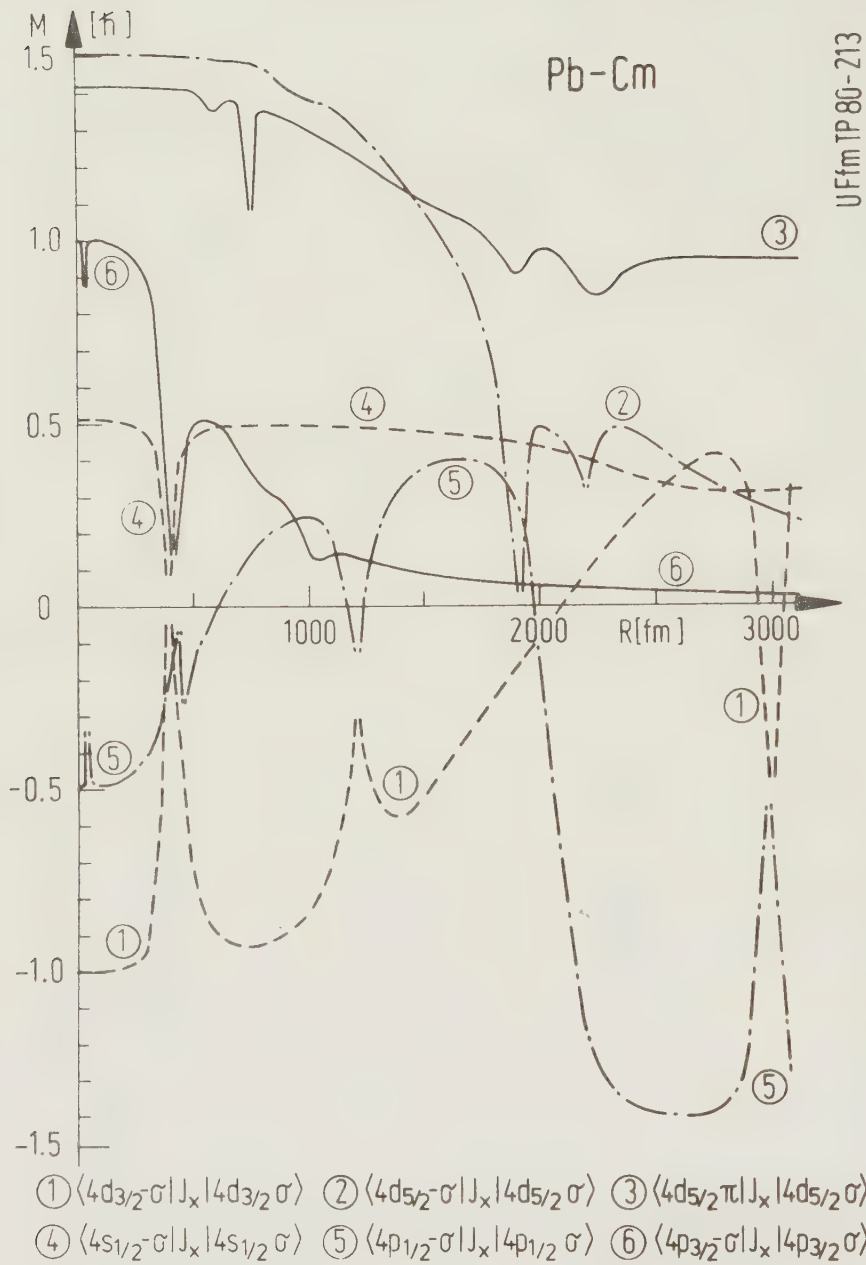


Bild 109: Rotationsmatrixelemente des Pb-Cm-Quasimoleküls
in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer
Maßstab).

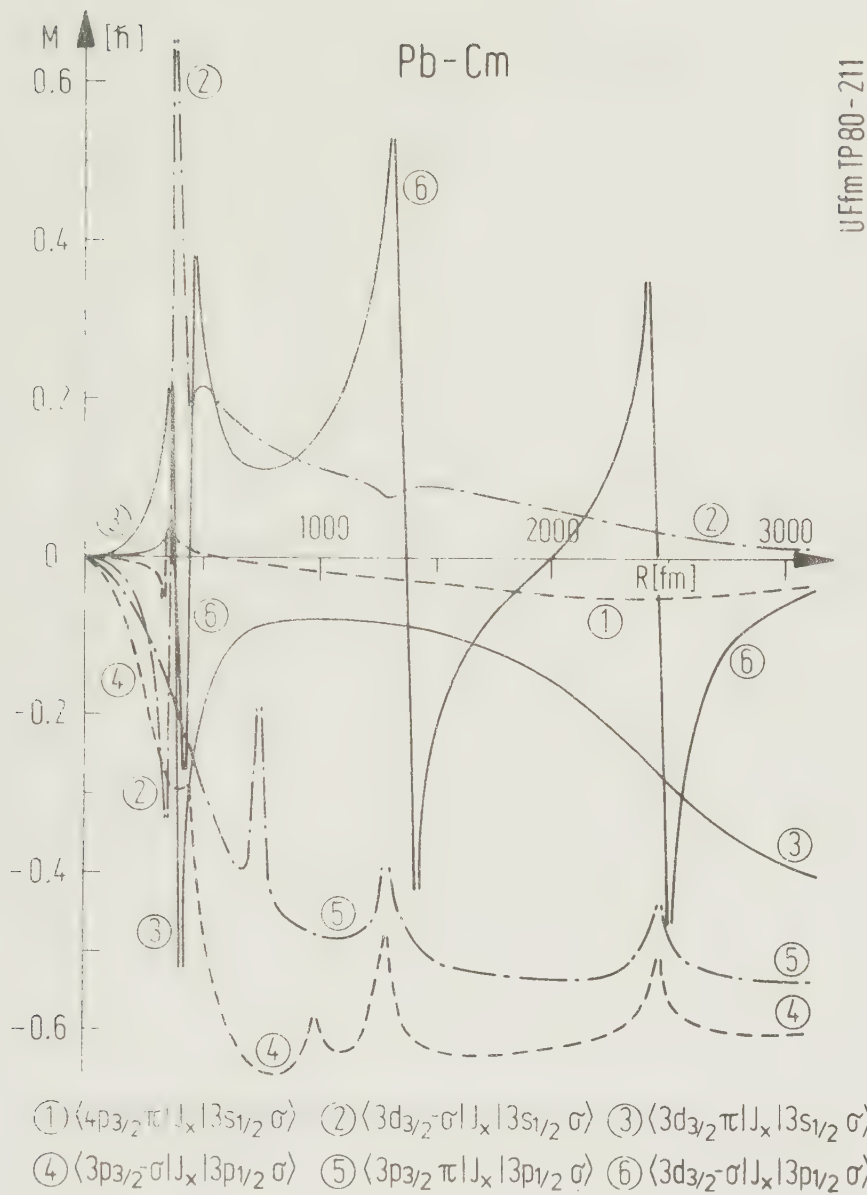


Bild 11o: Rotationsmatrixelemente des Pb-Cm-Quasimoleküls
in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer
Maßstab).

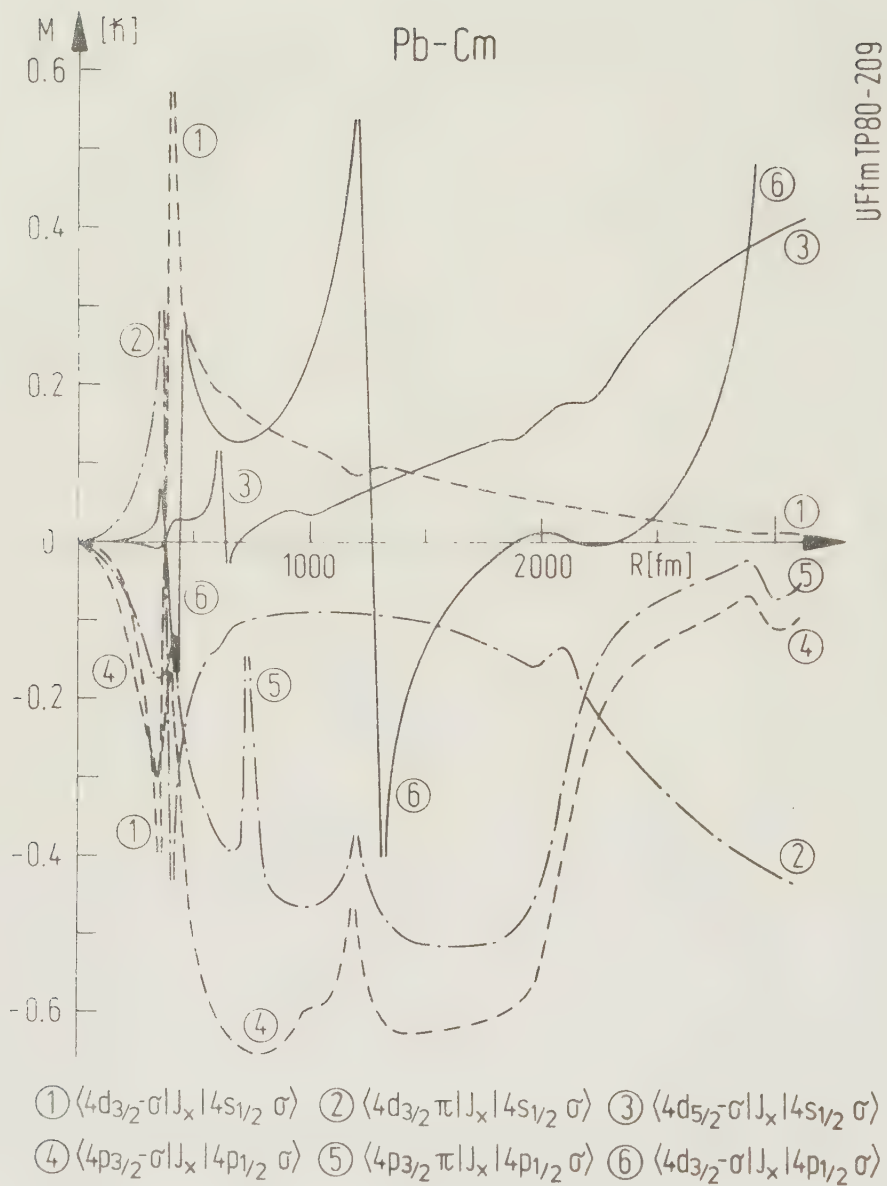


Bild 111: Rotationsmatrixelemente des Pb-Cm-Quasimoleküls
 in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer
 Maßstab).

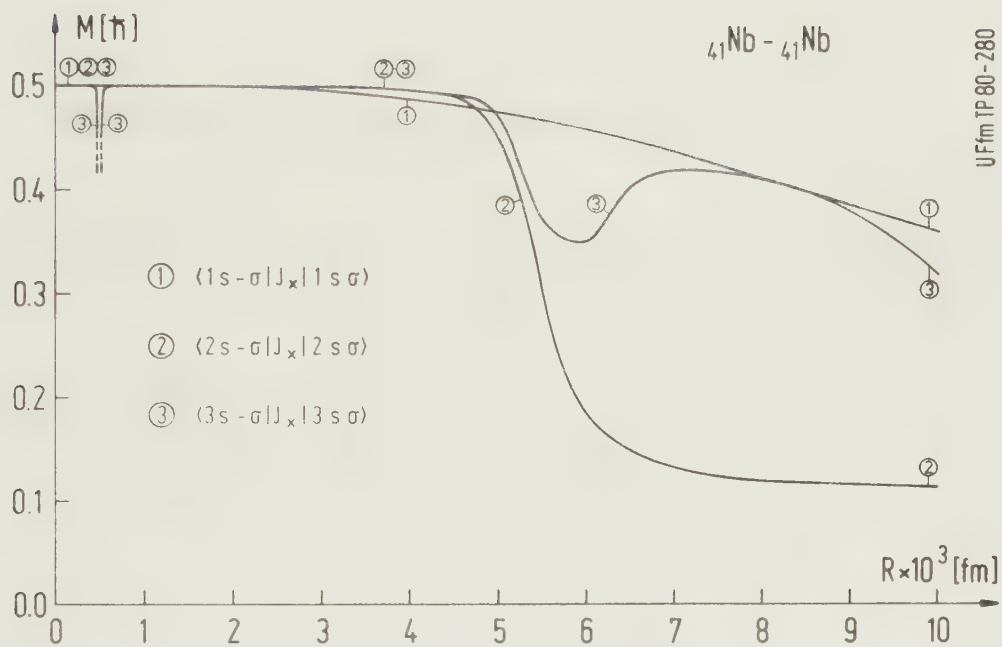


Bild 112: Die Rotationsmatrixelemente des Nb-Nb-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer Maßstab)⁷⁰.

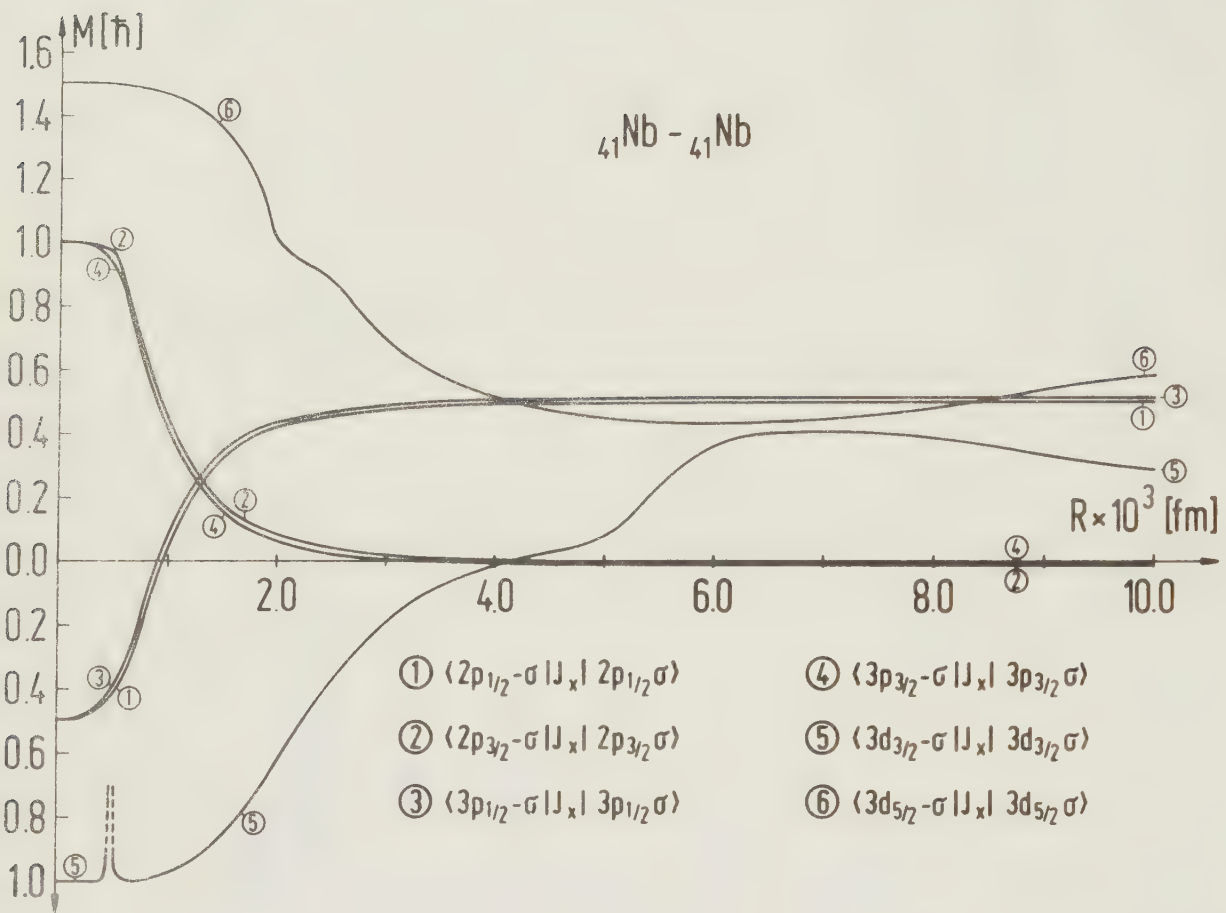


Bild 113: Die Rotationsmatrixelemente des Nb-Nb-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer Maßstab)⁷⁰.

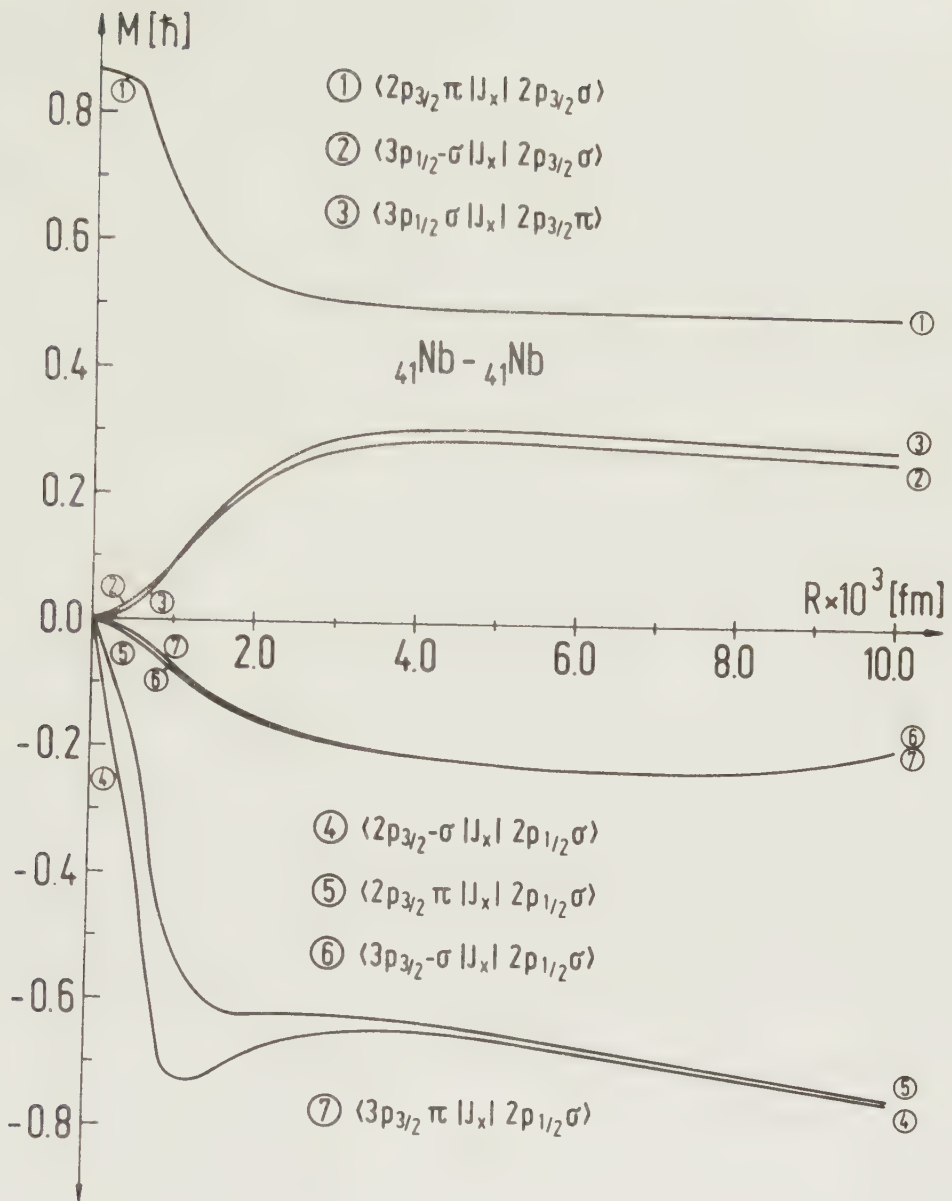


Bild 114: Die Rotationsmatrixelemente des Nb-Nb-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer Maßstab) ⁷⁰.

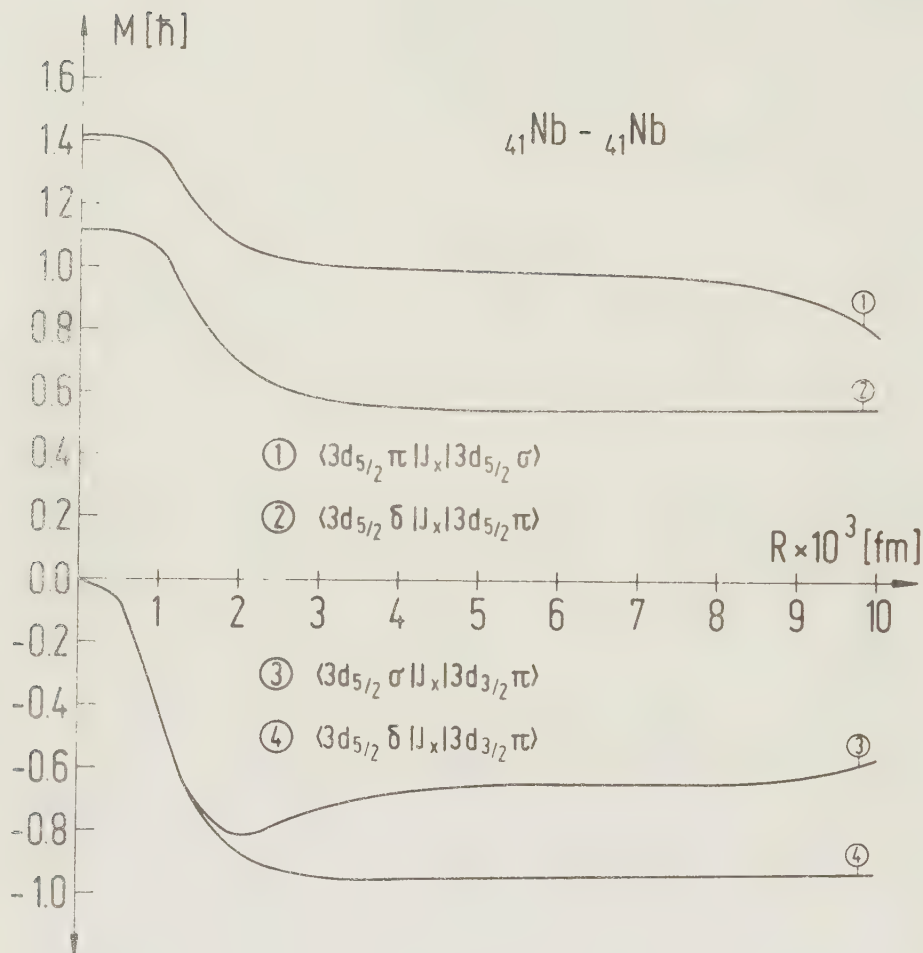


Bild 115: Die Rotationsmatrixelemente des Nb-Nb-Quasimoleküls in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand (linearer Maßstab)⁷⁰.

VII.3 Vergleich der beiden Kopplungsarten

Der Wechselwirkungsoperator $\frac{\partial}{\partial t}$ in den gekoppelten Kanalgleichungen der Besetzungsamplitude spaltet sich in einen radialen- und Rotationsteil auf Gl.(3). Wir nehmen an, daß die Kerne während des Stoßes sich auf Rutherfordhyperbelbahnen bewegen, die wir mit Hyperbelfunktionen parametrisieren können

$$R = a(\epsilon \cosh \xi + 1) \quad (\text{VII.41})$$

$$t = (M_{\text{red}} a^3 / Z_1 Z_2 e^2)^{\frac{1}{2}} (\epsilon \sinh \xi + \xi) \quad .$$

Mit

$$\epsilon = (1 + b^2 / a^2)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{VII.42})$$

bezeichnen wir die Exzentrizität der Hyperbel. Der Parameter $2a$ ist in Zentralstößen der Abstand zwischen den streuenden Kernen bei der kleinsten Annäherung

$$a = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2 E_{\text{cm}}} \quad . \quad (\text{VII.43})$$

M_{red} ist die reduzierte Masse des Zweizentrensystems

$$M_{\text{red}} = \frac{M_1 \cdot M_2}{M_1 + M_2} \quad , \quad (\text{VII.44})$$

b der Stoßparameter und E_{cm} die Massenschwerpunktsenergie der Ionen.

Für die momentane radiale Geschwindigkeit können wir auch schreiben

$$\dot{R} = \frac{dR}{dt} = \frac{dR}{d\mathfrak{f}} \frac{d\mathfrak{f}}{dt} = a \cdot \epsilon \sinh \mathfrak{f} \cdot \frac{a}{R} \sqrt{\frac{Z_1 Z_2 e^2}{M_{\text{red}} a^3}} \quad (\text{VII.45})$$

Da nach Gleichung (41) $\cosh \mathfrak{f} = \frac{R-a}{a\epsilon}$ ist und die trigonometrische Beziehung $\cosh^2 \mathfrak{f} - \sinh^2 \mathfrak{f} = 1$ gilt, folgt durch Einsetzen

$$\sinh \mathfrak{f} = \frac{1}{a\epsilon} \sqrt{(R-a)^2 - a^2 \left(1 + \frac{b^2}{a^2}\right)}$$

und damit

$$\dot{R} = \sqrt{R^2 - 2aR - b^2} \cdot \frac{1}{R} \sqrt{\frac{Z_1 Z_2 e^2}{M_{\text{red}} a}} \quad (\text{VII.46})$$

Die Projektilgeschwindigkeit ist definiert durch

$$v_{\infty} = \sqrt{\frac{2E_{\text{cm}}}{M_{\text{red}}}} \quad (\text{VII.47})$$

Einsetzen der Gleichung (43) in (47) ergibt

$$v_{\infty} = \sqrt{\frac{Z_1 Z_2 e^2}{a \cdot M_{\text{red}}}} \quad (\text{VII.48})$$

und damit folgt aus (46)

$$\dot{R} = \frac{v_{\infty}}{R} \sqrt{R^2 - 2aR - b^2} \quad (\text{VII.49})$$

Der Betrag der intrinsischen Rotation der Quasimoleküle ist

$$\omega = b \cdot v_{\infty} / R^2 \quad (VII.50)$$

Verwenden wir die beiden letzten Gleichungen zur Beschreibung des $\frac{\partial}{\partial t}$ -Operators, so finden wir

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{v_{\infty}}{R} \sqrt{R^2 - 2aR - b^2} \quad \frac{\partial}{\partial R} - \frac{v_{\infty} b}{R^2} j \quad (VII.51)$$

Um die radiale und die Rotationskopplung miteinander vergleichen zu können, haben wir für das Rotationsmatrixelement folgende Abschätzung nach oben vorgenommen

$$\left(\frac{1}{R}\right) |\vec{\omega} \cdot \vec{j}| = \frac{v_{\infty} b}{R R^2} j < \frac{j}{R} \quad (VII.52)$$

Somit haben die $\frac{\partial}{\partial R}$ und die $\frac{J_x}{R}$ Matrixelemente dieselbe Einheit. Die tatsächlichen Werte der Rotationskopplung liegen unterhalb der Werte der $\frac{J_x}{R}$ Matrixelemente, da wir eine obere Abschätzung vorgenommen haben. In den Bildern 116 und 117 haben wir für das Pb-Pb-System zwei sich unterschiedlich verhaltende Matrixelemente dargestellt. Bild 116 zeigt, daß die Hauptkopplung an den $1s_{\frac{1}{2}}$ Zustand durch die radialen Matrixelemente von den höheren $ns_{\frac{1}{2}}$ Zuständen erfolgt. Die Rotationskopplung zu dem $1s_{\frac{1}{2}}$ Zustand ist vernachlässigbar.

Bild 117 zeigt jedoch, daß für bestimmte Übergänge die

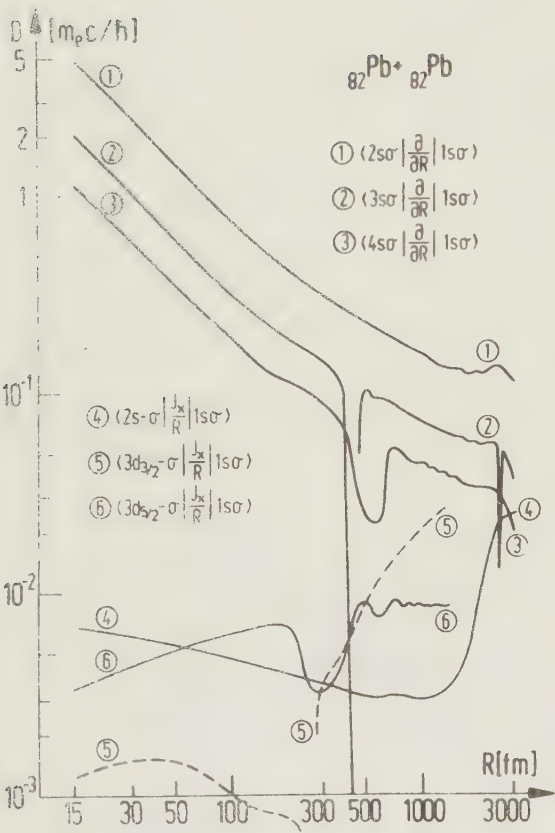
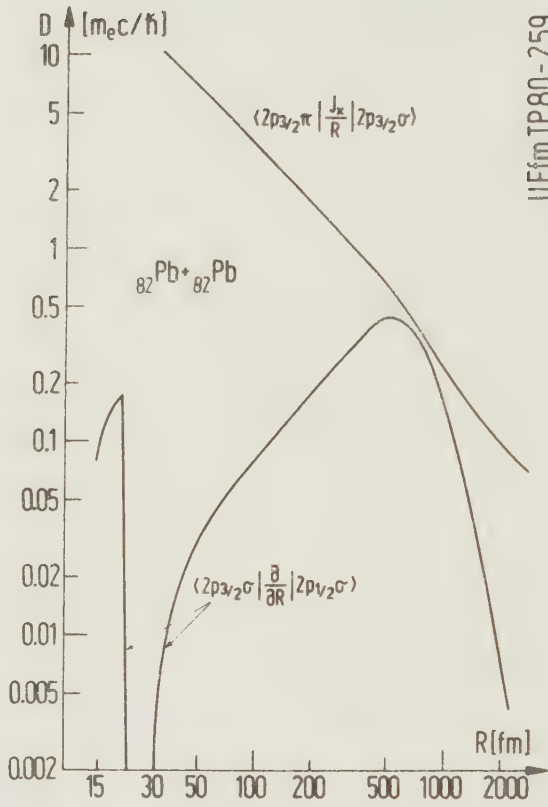


Bild 116



UFfm TP80-259

Bild 117

Vergleich der Beträge der radialen Matrixelemente mit den Beträgen der Rotationsmatrixelemente des Pb-Pb-Quasimoleküls.

Rotationskopplung dominant ist. Welche Rotationskopplungen einen Beitrag zu der Besetzungsamplitude liefern, können wir direkt an den Darstellungen der J_x Matrixelemente ablesen. Betrachten wir den 2. Term der Gleichung (51), so sehen wir, daß die Rotationskopplung mit $\frac{1}{R^2}$ gewichtet wird, d.h., je größer der Zweizentrenabstand, desto kleiner wird der Rotationsterm des $\frac{\partial}{\partial t}$ Operators. Dies hat zur Folge, daß nur die Matrixelemente, die im Bereich $R \rightarrow 0$ ungleich Null sind einen Beitrag zur Besetzungsamplitude liefern.

Berechnen wir die 21 niedrigsten s und p Zustände der $s_{\frac{1}{2}}$, $p_{\frac{1}{2}}$, $p_{\frac{3}{2}}$, $d_{\frac{3}{2}}$ und $d_{\frac{5}{2}}$ Zustände (bezogen auf die Asymptotik $R \rightarrow 0$), so hätten wir 406 mögliche Rotationsmatrixelemente bei den gekoppelten Kanalrechnungen der Besetzungsamplitude zu berücksichtigen. Durch das vorher diskutierte Auswahlkriterium müssen wir nur 42 Rotationskopplungen berücksichtigen, da alle anderen J_x -Matrixelemente keinen Beitrag liefern.

Dies können wir noch durch die Tabellen 17a und 17b verdeutlichen. In diesen Tabellen sind die radialen Matrixelemente mit dem Ausdruck (49) und die Rotationsmatrixelemente mit (50) multipliziert worden. Beide Kopplungsarten haben nun dieselbe Einheit (sec^{-1}) und können direkt miteinander verglichen werden. Als Beispiel wählten wir das Pb-Cm-Quasimolekül.

Mit $E_{\text{lab}} = 4,7$ MeV/Nukleon und einem Stoßparameter von $B = 10 \text{ fm}$ ist die Projektilenergie (Gl.47) $v_{\infty} = 0,1c$, der Parameter (Gl.43) $2a = 21,56 \text{ fm}$ und die minimale Annäherung $R_{\text{min}} = 25,49 \text{ fm}$ der beiden streuenden Kerne bestimmt. Nur die in Tabelle 16 aufgelisteten Rotationskopplungen sind von derselben Größenordnung wie die stärksten radialen Kopplungen. Die in Tabelle 16 nicht enthaltenen Rotationskopplungen sind um 3 bis 4 Größenordnungen kleiner. Weiterhin können wir erkennen, daß die Werte der Rotationskopplung multipliziert mit dem Ausdruck (50) im Abstandsbereich $30 \text{ fm} \leq R \sim 300 \text{ fm}$ um zwei Dekaden abnehmen, d.h., bei größeren Stoßparametern $b > 300 \text{ fm}$ spielen in dynamischen Rechnungen zur K-Schalenionisation, Röntgenspektren usw. die Rotationsmatrixelemente eine untergeordnete Rolle.

Tabelle 17a

R (fm)	$\langle 2s\sigma \frac{\partial}{\partial R} 1s\sigma \rangle$ (sec ⁻¹)	$\langle 3p_{\frac{1}{2}}\pi \frac{\partial}{\partial R} 2p_{\frac{1}{2}}\sigma \rangle$ (sec ⁻¹)	$\langle 1s\sigma j_x 1s\sigma \rangle$ (sec ⁻¹)	$\langle 2p_{\frac{3}{2}}\pi j_x 2p_{\frac{3}{2}}\sigma \rangle$ (sec ⁻¹)
30	-1.17470-01	-1.14340-01	2.15080-01	3.71580-01
35	-1.33490-01	-1.33820-01	1.58040-01	2.71480-01
40	-1.39840-01	-1.39260-01	1.21020-01	2.01820-01
45	-1.34820-01	-1.39420-01	9.56360-02	1.64560-01
50	-1.29400-01	-1.34400-01	7.74760-02	1.33570-01
55	-1.25560-01	-1.30300-01	6.40390-02	1.10450-01
65	-1.12650-01	-1.20060-01	4.58630-02	7.91020-02
70	-1.10750-01	-1.13380-01	3.95500-02	6.82070-02
80	-9.73140-02	-1.02480-01	3.02880-02	5.22170-02
90	-8.99110-02	-9.39800-02	2.39380-02	4.12520-02
100	-8.10860-02	-8.29990-02	1.93940-02	3.34060-02
125	-6.54640-02	-6.89350-02	1.24200-02	2.13620-02
150	-5.85050-02	-5.91840-02	8.62990-03	1.48160-02
175	-5.13810-02	-5.18790-02	6.34390-03	1.08670-02
200	-4.75040-02	-4.55720-02	4.85970-03	8.30100-03
250	-4.00420-02	-3.60610-02	3.11340-03	5.27830-03
300	-3.43730-02	-2.91890-02	2.16410-03	3.62770-03
350	-3.05040-02	-2.51490-02	1.59130-03	2.61000-03
400	-2.48830-02	-2.02940-02	1.21930-03	1.77520-03
450	-2.43960-02	-1.85260-02	9.64100-04	1.39250-03
500	-2.41260-02	-1.47360-02	7.81420-04	1.18740-03
550	-2.28740-02	-1.42830-02	6.46160-04	9.72460-04
600	-2.20280-02	-1.37080-02	5.43220-04	8.01000-04
650	-2.09480-02	-1.26880-02	4.63050-04	6.66620-04
700	-2.00000-02	-1.19610-02	3.99400-04	5.60780-04
750	-1.91630-02	-1.14450-02	3.48020-04	4.76700-04
800	-1.84220-02	-1.10970-02	3.05940-04	4.09240-04
900	-1.71700-02	-1.07000-02	2.41790-04	3.09880-04
1000	-1.61580-02	-1.05110-02	1.95840-04	2.42210-04
1100	-1.53280-02	-1.03940-02	1.61800-04	1.94410-04
1200	-1.46430-02	-1.01910-02	1.35880-04	1.59540-04
1300	-1.40750-02	-8.98080-03	1.15670-04	1.33360-04
1400	-1.36060-02	-8.80820-03	9.96200-05	1.13210-04
1500	-1.32220-02	-9.59160-03	8.66510-05	9.73760-05
1600	-1.29160-02	-9.72450-03	7.60180-05	8.46930-05
1700	-1.26780-02	-9.71710-03	6.71900-05	7.43710-05
1800	-1.25040-02	-9.65980-03	5.97790-05	6.58510-05
1900	-1.23870-02	-9.57560-03	5.34960-05	5.87330-05
2000	-1.23180-02	-9.47350-03	4.81210-05	5.27200-05
2100	-1.22740-02	-9.35160-03	4.34870-05	4.75890-05
2200	-1.22330-02	-9.19440-03	3.94620-05	4.31750-05
2300	-1.21520-02	-8.92440-03	3.59460-05	3.93450-05
2400	-1.19960-02	-8.02880-03	3.28550-05	3.59990-05
2500	-1.17520-02	-7.82010-03	3.01190-05	3.30550-05
2600	-1.14400-02	-8.68060-03	2.76950-05	3.04480-05
2700	-1.10880-02	-8.74020-03	2.55330-05	2.81270-05
2800	-1.07220-02	-8.68640-03	2.35940-05	2.60480-05
2900	-1.03610-02	-8.60260-03	2.18510-05	2.41740-05
3000	-1.00200-02	-8.51220-03	2.02840-05	2.24760-05
3100	-9.69630-03	-8.42060-03	1.88640-05	2.09280-05

Tabelle 17b

R (fm)	$\langle 3p_{\frac{1}{2}}^{-1} \gamma_x 2p_{\frac{1}{2}}^{-1} \rangle$ (sec ⁻¹)	$\langle 2s_{\frac{1}{2}} \gamma_x 1s_{\frac{1}{2}} \rangle$ (sec ⁻¹)	$\langle 2p_{\frac{3}{2}}^{-1} \frac{\partial}{\partial R} 2s_{\frac{1}{2}} \rangle$ (sec ⁻¹)	$\langle 3s_{\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial R} 1s_{\frac{1}{2}} \rangle$ (sec ⁻¹)
30	6.99910-05	2.70890-04	-1.50840-04	-4.77710-02
35	6.89580-05	2.29150-04	-1.57910-04	-5.44810-02
40	6.70180-05	1.99560-04	-6.01530-04	-5.72860-02
45	6.43170-05	1.73240-04	-4.62860-04	-5.54450-02
50	6.15950-05	1.44700-04	-5.46950-04	-5.34270-02
55	5.90980-05	1.29250-04	-6.02200-04	-5.20380-02
65	5.44490-05	1.02070-04	-1.07240-03	-4.70240-02
70	5.24230-05	9.19250-05	-1.47070-03	-4.63750-02
80	4.87670-05	7.76030-05	-1.48650-03	-4.10140-02
90	4.59380-05	6.70020-05	-1.69590-03	-3.81030-02
100	4.34910-05	5.78220-05	-1.41080-03	-3.45410-02
125	3.91510-05	4.45490-05	-2.74260-03	-2.81930-02
150	3.66630-05	3.71510-05	-4.71450-03	-2.54310-02
175	3.56460-05	3.03370-05	-6.45580-03	-2.25040-02
200	3.57570-05	2.62180-05	-8.88650-03	-2.09360-02
250	3.99530-05	2.09930-05	-1.76860-02	-1.78340-02
300	5.31670-05	1.81540-05	-3.84550-02	-1.53400-02
350	9.31240-05	1.73880-05	-1.07170-01	-1.29950-02
400	-5.71600-05	2.04670-05	-4.64690-01	-9.05440-03
450	-3.62370-05	1.71330-06	-2.85930-01	-1.09080-02
500	-2.28000-05	5.12630-06	-7.59660-02	-1.06790-02
550	-1.60970-05	5.69900-06	-2.91650-02	-1.01960-02
600	-1.23210-05	5.67860-06	-1.59320-02	-9.82000-03
650	-9.42890-06	5.49380-06	-9.57220-03	-9.55260-03
700	-8.03010-06	5.26650-06	-6.24200-03	-9.06880-03
750	-6.83450-06	5.03540-06	-4.30150-03	-8.70090-03
800	-5.91580-06	4.81750-06	-3.08060-03	-8.37730-03
900	-4.61130-06	4.43440-06	-1.70340-03	-7.82710-03
1000	-3.72950-06	4.12450-06	-9.80090-04	-7.37600-03
1100	-3.10580-06	3.87460-06	-5.55420-04	-6.99940-03
1200	-2.64480-06	3.67560-06	-2.77710-04	-6.68170-03
1300	-2.29530-06	3.51860-06	-7.87060-05	-6.41150-03
1400	-2.02450-06	3.39780-06	7.53290-05	-6.18020-03
1500	-1.80950-06	3.31260-06	2.06640-04	-5.98100-03
1600	-1.63870-06	3.25350-06	3.25280-04	-5.80990-03
1700	-1.50150-06	3.22130-06	4.39460-04	-5.66160-03
1800	-1.39030-06	3.21370-06	5.56590-04	-5.53230-03
1900	-1.29980-06	3.22690-06	6.82020-04	-5.41830-03
2000	-1.22580-06	3.25450-06	8.20330-04	-5.31400-03
2100	-1.16520-06	3.28130-06	9.76390-04	-5.21120-03
2200	-1.11340-06	3.29170-06	1.15210-03	-5.10120-03
2300	-1.06760-06	3.26280-06	1.34720-03	-4.97010-03
2400	-1.02480-06	3.17120-06	1.55770-03	-4.80570-03
2500	-9.81410-07	2.99960-06	1.78160-03	-4.60220-03
2600	-9.36600-07	2.75990-06	2.01730-03	-4.36500-03
2700	-8.93400-07	2.46970-06	2.27160-03	-4.10630-03
2800	-8.46320-07	2.14750-06	2.55660-03	-3.84240-03
2900	-8.03520-07	1.81200-06	2.88580-03	-3.58520-03
3000	-7.63500-07	1.47370-06	3.27660-03	-3.34400-03
3100	-7.25180-07	1.13190-06	3.75390-03	-3.12170-03

VIII. Die Zweizentrendiracgleichung für Vielelektronen- systeme

In dieser Arbeit wurden bisher nur die Lösungen der Zweizentrendiracgleichung für Einelektronensysteme untersucht. Da bei einer Streuung eines Schwerions an einem schweren Targetatom dem kurzzeitig entstehenden Quasimolekül viele Elektronen angehören, ist die Frage nach dem Einfluß der Elektron-Elektron-Wechselwirkung auf die Eigenwerte des Zweizentrendiracoperators nicht einfach zu beantworten. Rihan et al.⁸¹ haben gezeigt, daß der nichtdiagonale Anteil der Elektron-Elektron-Wechselwirkung für die am stärksten gebundenen Zustände unberücksichtigt bleiben kann, denn die dazugehörige Relaxationszeit ist wesentlich größer als die zur Verfügung stehende Stoßzeit. Die Elektronenniveaus werden sich in den Korrelationsdiagrammen durch die Abschirmung verschieben. Je genauer wir die Besetzungsamplitude usw. der Quasimoleküle berechnen wollen, um so weniger können wir auf die Elektron-Elektron-Wechselwirkung verzichten. Dies hat zur Folge, daß wir die Zweizentrendiracgleichung mit einem molekularen Thomas-Fermi oder Hartree-Fock-(Slater)-Potential lösen müssen. Es genügt jedoch nicht nur die Vielelektronenenergien der Quasimoleküle zu berechnen. Vielmehr benötigen wir vor allen Dingen abgeschirmte Zweizentrenwellenfunktionen, die wir zur Berech-

nung der Kopplungsmatrixelemente benötigen.

Unser Verfahren zur Lösung der Zweizentrendiracgleichung können wir für alle Zweizentrenpotentiale anwenden, die sich nach Kugelfunktionen entwickeln lassen. Ein relativistisches Zweizentren-Thomas-Fermi-Potential wird von E.Gross (Frankfurt)⁶⁶ erarbeitet. In diesem Abschnitt werden wir zeigen, wie wir das mittlere Potential des Hartree-Fock-Formalismus⁸² nach Multipolen entwickeln können. Der Austauschterm bzw. die entsprechende Slater-Approximation sind nicht nach Kugelfunktionen zu entwickeln. Deshalb können wir nur die Methode zur Lösung der Zweizentren-Hartree-Diracgleichung angeben.

VIII.1 Das Hartree-Verfahren

Die Zweizentren-Hartree-Fock-Diracgleichung lautet

($\hbar=c=1$)

$$(H_{\text{Dirac}}(\vec{r}) + V_{\text{TC}}(\vec{r}) - V_m^i(\vec{r}) + V_a^i(\vec{r})) \phi_{i\mu}(\vec{r}) = E_i \phi_{i\mu}(\vec{r}), \quad (\text{VIII.1})$$

wobei

$$H_{\text{Dirac}}(\vec{r}) = i\gamma_5 \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} + \frac{1}{r} - \frac{\beta}{r} \hat{K} + \beta m_e \quad (\text{VIII.2})$$

der Diracoperator,

$$V_{\text{TC}}(\vec{r}) = - \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r} - \vec{S}_1|} - \frac{Z_2 e^2}{|\vec{r} - \vec{S}_2|} \quad (\text{VIII.3})$$

das Zweizentrencoulombpotential,

$$V_m^i(\vec{r}) = \sum_{\nu \neq i} \int \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_\nu|} |\phi_{\nu\mu}(\vec{r}_\nu)|^2 d\tau_\nu \quad (\text{VIII.4})$$

das mittlere Potential des i-ten Teilchens und

$$V_a^i(\vec{r}) = - \sum_{\nu \neq i} \int \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_\nu|} \frac{\phi_{i\mu}^*(\vec{r}_i) \phi_{i\mu}(\vec{r}_\nu) \phi_{\nu\mu}^*(\vec{r}_\nu) \phi_{\nu\mu}(\vec{r}_i)}{\phi_{i\mu}^*(\vec{r}_i) \phi_{i\mu}(\vec{r}_i)} d\tau_\nu \quad (\text{VIII.5})$$

der Austauschterm des i-ten Teilchens ist.

Für diesen Austauschterm lautet die Slater-Näherung⁸³

$$V_a^i(\vec{r}) = - \frac{3\alpha_s}{2\pi} (3r^2 g_i(\vec{r}))^{\frac{1}{2}} \quad \text{mit } \alpha_s = \frac{2}{3}. \quad (\text{VIII.6})$$

Diese Approximation ist so lange gut, so lange die gesamte Elektronendichte $g_i(\vec{r})$ nicht zu klein ist.

$\phi_{i\mu}(\vec{r})$ ist die Wellenfunktion des i -ten Zustandes mit der magnetischen Quantenzahl μ . E_i ist der Eigenwert des i -ten Zustandes. Mit Hilfe der Zweizentren-einelektronenwellenfunktionen

$$\psi_{i\mu}(\vec{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} f_{i\mathbf{k}}^{\mu}(r) \chi_{\mathbf{k}}^{\mu} \\ g_{i\mathbf{k}}^{\mu}(r) \chi_{-\mathbf{k}}^{\mu} \end{pmatrix} \quad (\text{VIII.7})$$

berechnen wir das mittlere Potential $V_m^i(\vec{r})$ für das i -te Teilchen, indem wir über alle anderen Zustände ν summieren

$$V_{m\mu}^i(\vec{r}) = \sum_{\nu \neq i} \int \frac{e^2}{r_{i\nu}} |\psi_{\nu\mu}(\vec{r}'_{\nu})|^2 d\tau_{\nu} \quad (\text{VIII.8})$$

Dieses mittlere Potential beschreibt die Coulombabstoßung, die zwischen den Elektronen und dem i -ten Elektron wirkt. Wir erhalten für das i -te Elektron ein mittleres Zentralfeld

$$V_{\text{eff}}^i = - V_{\text{TC}}(\vec{r}) + V_{m\mu}^i(\vec{r}) \quad (\text{VIII.9})$$

das sich durch Mittelung des fluktuierenden Einflusses aller anderen Elektronen und dem Zweizentrencoulombpotential zusammensetzt. Die einzelnen Elektronen bewegen sich in ihrem jeweiligen effektiven Potential unabhängig voneinander. Dieses Potential wird in die ZweizentrenDiracgleichung eingesetzt und die entsprechenden gekoppelten radialen Differentialgleichungen (Gl.II.8) nach dem in Kapitel II beschriebenen Integrationsverfahren gelöst.

Die neuen Eigenfunktionen $\phi_{i\mu}(\vec{r})$ erfüllen die Gleichung

$$(H_{\text{Dirac}}(\vec{r}) + V_{\text{TC}}(\vec{r}) - V_{\text{m}}^i(\vec{r})) \phi_{i\mu}(\vec{r}) = \tilde{E}_i \phi_{i\mu}(\vec{r}) . \quad (\text{VIII.10})$$

Mit den neuen Wellenfunktionen $\phi_{i\mu}(\vec{r})$ können wir analog zu der Gleichung (8) ein neues mittleres Potential berechnen

$$\tilde{V}_{\text{m}\mu}^i(\vec{r}) = \sum_{\nu \neq i} \int \frac{e^2}{r_{i\nu}} |\phi_{\nu\mu}(\vec{r}_\nu)|^2 d\tau_\nu , \quad (\text{VIII.11})$$

das in die gekoppelten radialen Differentialgleichungen eingesetzt, modifizierte Eigenfunktionen $\tilde{\phi}_{i\mu}(r)$ liefert.

Diese Iterationsmethode (Hartree-Verfahren)⁸⁴ können wir solange fortführen, bis eine ausreichende Konvergenz der Eigenwerte und Eigenfunktionen der Zweizentren-Hartree-Diracgleichung erreicht ist.

VIII.2 Die Entwicklung des mittleren Potentials nach Multipolen

Wir bezeichnen mit $g_{\nu\mu}(\vec{r}) = \phi_{\nu\mu}^*(\vec{r})\phi_{\nu\mu}(\vec{r})$ die Dichte des ν -ten Elektrons. Jeder Zahl $\nu \in \mathbb{N}$ wird ein berechneter Zustand zugewiesen ($\nu = 1 \Rightarrow 1s\sigma$, $\nu = 2 \Rightarrow 2s\sigma$, $\nu = 3 \Rightarrow 2p\frac{1}{2}\sigma$, $\nu = 4 \Rightarrow 2p\frac{3}{2}\sigma$, $\nu = 5 \Rightarrow 2p\frac{3}{2}\tau$ usw. geordnet nach aufsteigender Hauptquantenzahl, Drehimpuls, magnetischer Quantenzahl, usw.).

Für die magnetische Quantenzahl gilt die Vorschrift

$$\mu = (-1)^{\gamma+1} \omega_{\gamma} \quad (\text{VIII.12})$$

mit $\omega_{\gamma} = \text{Integer } \left| \frac{\gamma}{3} \right| + \frac{1}{2}$ und $\gamma = 1, 2, 3, 4$.

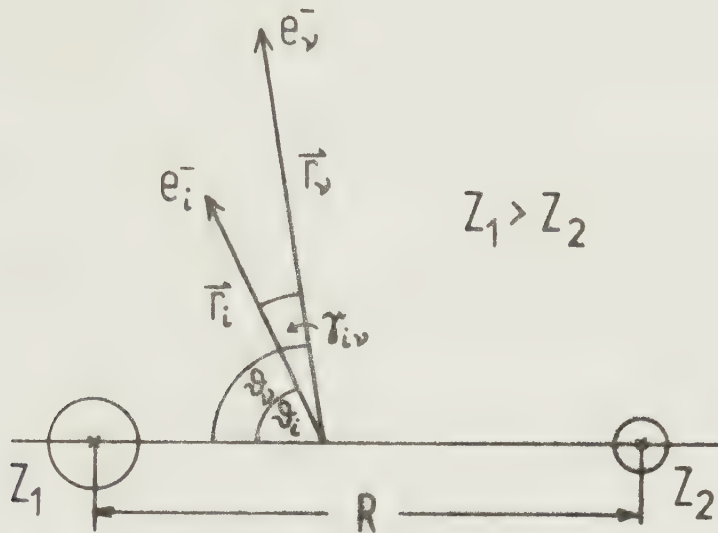
Damit wir die Anzahl der Elektronenzustände im mittleren Potential variieren können, führen wir den Faktor $\alpha_{\nu\mu}$ ein. Nehmen wir an, der Zustand $\phi_{\nu\mu}$ sei nicht besetzt, so gilt $\alpha_{\nu\mu} = 0$. Ist der Zustand besetzt, so setzen wir $\alpha_{\nu\mu} = 1$. Mit den $\alpha_{\nu\mu}$ können wir den Ionisationsgrad des Quasimoleküls durch das mittlere Potential steuern. Für das i -te Elektron finden wir

$$V_{r\mu}^i(\vec{r}) = \sum_{\nu \neq i} \int \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_{\nu}|} \alpha_{\nu\mu} g_{\nu\mu}(\vec{r}_{\nu}) d\tau_{\nu} \quad (\text{VIII.13})$$

Wählen wir als Koordinatenursprung den Ladungsschwerpunkt,

so verdeutlicht das Bild 118 die Multipolentwicklung
des $\frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_v|}$ Terms⁶⁷

Bild 118:



$$\frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_v|} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{q=-l}^l \frac{1}{2l+1} Y_{lq}^* (\vartheta_v, \varphi_v) Y_{lq} (\vartheta_i, \varphi_i) . \quad (\text{VIII.14})$$

Berücksichtigen wir in Gleichung (14) noch die Beziehung

$$Y_{lq}^* (\vartheta, \varphi) = (-1)^q Y_{l-q} (\vartheta, \varphi) \quad (\text{VIII.15})$$

und setzen das Ganze in das mittlere Potential ein, so
erhalten wir

$$V_{\vec{r}}^i (\vec{r}) = \sum_{\nu \neq i} 4\pi e^2 \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{q=-l}^l \left(\frac{(-1)^q}{2l+1} Y_{lq} (\vartheta_i, \varphi_i) \right. \\ \left. * \int_0^{2\pi} d\varphi_v \int_0^{\pi} \sin \vartheta_v d\vartheta_v Y_{l-q} (\vartheta_v, \varphi_v) \int_0^{\infty} r_v^2 dr_v \varrho_{\nu\mu}(r_v) \frac{r_v^l}{r_i^{l+1}} \right) . \quad (\text{VIII.16})$$

Die Integration über die radiale Koordinate r_ν können wir auch schreiben als

$$\int_0^\infty r_\nu^2 dr_\nu g_{\nu\mu}(r_\nu) \frac{r_i^1}{r_\nu^{1+1}} = \frac{1}{r_i^{1+1}} \int_0^{r_i} r_\nu^{1+2} dr_\nu g_{\nu\mu}(r_\nu) +$$

$$+ r_i^1 \int_{r_i}^\infty g_{\nu\mu}(r_\nu) r_\nu^{1-1} dr_\nu \quad . \quad (\text{VIII.17})$$

Zur Berechnung der Elektronendichte des ν -ten Elektrons,

$g_{\nu\mu}(\vec{r}_\nu)$ verwenden wir die Beziehungen

$$\phi_{\nu\mu}^*(\vec{r}_\nu) = \sum_{\mathbf{k}} (f_{\mathbf{k}\mu}(r_\nu) \chi_{\mathbf{k}}^{+\mu}(\vartheta_\nu, \varphi_\nu) - i g_{\mathbf{k}\mu}(r_\nu) \chi_{-\mathbf{k}}^{+\mu}(\vartheta_\nu, \varphi_\nu)) \quad (\text{VIII.18})$$

$$\phi_{\nu\mu}(\vec{r}_\nu) = \sum_{\bar{\mathbf{k}}} \begin{pmatrix} f_{\bar{\mathbf{k}}\mu}(r_\nu) \chi_{\bar{\mathbf{k}}}^{\mu}(\vartheta_\nu, \varphi_\nu) \\ i g_{\bar{\mathbf{k}}\mu}(r_\nu) \chi_{-\bar{\mathbf{k}}}^{\mu}(\vartheta_\nu, \varphi_\nu) \end{pmatrix} \quad . \quad (\text{VIII.19})$$

Unter Verwendung der Spin-Wellenfunktionen (Gl.II.4), der zweikomponentigen Einheitsspinoren (II.5), ihrer Normierung auf die Deltafunktion

$$\chi^{*m} \chi^{\bar{m}} = \delta_{m\bar{m}} \quad (\text{VIII.20})$$

und der Beziehung der Kugelfunktion zu ihrer Komplexkonjugierten (Gl.15), erhalten wir für die Dichte des ν -ten Elektrons

$$\begin{aligned}
 g_{\nu\mu}(r_\nu) = & \sum_{\kappa, \bar{\kappa}} (f_{\kappa\mu}(r_\nu) f_{\bar{\kappa}\mu}(r_\nu) \sum_{m=\pm\frac{1}{2}} \left(C(\kappa, m) C(\bar{\kappa}, m) (-1)^{\mu-m} \right. \\
 & \left. * Y_{1\kappa}^{-\mu+m}(\vartheta_\nu, \varphi_\nu) Y_{1\bar{\kappa}}^{\mu-m}(\vartheta_\nu, \varphi_\nu) \right) + g_{\kappa\mu}(r_\nu) g_{\bar{\kappa}\mu}(r_\nu) \\
 & * \sum_{m=\pm\frac{1}{2}} \left(C(-\kappa, m) C(-\bar{\kappa}, m) (-1)^{\mu-m} Y_{1-\kappa}^{-\mu+m}(\vartheta_\nu, \varphi_\nu) Y_{1-\bar{\kappa}}^{\mu-m}(\vartheta_\nu, \varphi_\nu) \right), \quad (\text{VIII.21})
 \end{aligned}$$

wobei wir als Abkürzungen der Clebsh-Gordan-Koeffizienten die Relationen

$$C(1_{\kappa} \frac{1}{2} j_{\kappa}, \mu-m, m) = C(\kappa, m) \quad (\text{VIII.22})$$

$$C(1_{\bar{\kappa}} \frac{1}{2} j_{\bar{\kappa}}, \mu-m, m) = C(\bar{\kappa}, m)$$

$$C(1_{-\kappa} \frac{1}{2} j_{-\kappa}, \mu-m, m) = C(-\kappa, m)$$

$$C(1_{-\bar{\kappa}} \frac{1}{2} j_{-\bar{\kappa}}, \mu-m, m) = C(-\bar{\kappa}, m)$$

verwendet haben.

Setzen wir die Dichte des ν -ten Elektrons (21) in das mittlere Potential (16) ein, so gilt

$$V_{m\mu}^i(r) = 4\pi e^2 \sum_{\nu \neq i} \alpha_{\nu\mu} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{q=-l}^l \left\{ \frac{(-1)^q}{2l+1} Y_l^q(\vartheta_i, \varphi_i) \right. \quad (\text{VIII.23})$$

$$\begin{aligned}
 & * \sum_{\kappa, \bar{\kappa}} \left(\sum_m C(\kappa, m) C(\bar{\kappa}, m) (-1)^{\mu-m} B_{(\kappa, l, q, \bar{\kappa})}^{\mu\nu} \right. \\
 & \left. \cdot \int_0^\infty r_\nu^2 dr_\nu f_{\kappa\mu}(r_\nu) f_{\bar{\kappa}\mu}(r_\nu) \frac{r_\nu^1}{r_\nu^{1+1}} + \sum_m C(-\kappa, m) C(-\bar{\kappa}, m) (-1)^{\mu-m} B_{(-\kappa, l, q, \bar{\kappa})}^{\mu\nu} \right. \\
 & \left. \cdot \int_0^\infty r_\nu^2 dr_\nu g_{\kappa\mu}(r_\nu) g_{\bar{\kappa}\mu}(r_\nu) \frac{r_\nu^1}{r_\nu^{1+1}} \right\}.
 \end{aligned}$$

Wobei wir die Winkelintegration über $\vartheta_\nu, \varphi_\nu$ ⁷³ schon ausgeführt haben

$$B_{(\kappa, l, q, \bar{\kappa})}^{\mu\nu} = \quad \quad \quad (\text{VIII.24})$$

$$= \int_0^{2\pi} d\varphi_\nu \int_0^\pi \sin\vartheta_\nu d\vartheta_\nu Y_{1\kappa}^{-\mu+m}(\vartheta_\nu, \varphi_\nu) Y_1^{-q}(\vartheta_\nu, \varphi_\nu) Y_{1\bar{\kappa}}^{\mu-m}(\vartheta_\nu, \varphi_\nu)$$

$$= \sqrt{\frac{(2l_\kappa+1)(2l+1)(2l_{\bar{\kappa}}+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} 1_\kappa & 1 & 1_{\bar{\kappa}} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1_\kappa & 1 & 1_{\bar{\kappa}} \\ -\mu+m & -q & \mu-m \end{pmatrix}.$$

Die Summation über q in der Gleichung (23) bricht zusammen, da für die Wignerschen $3j$ -Symbole in der Gleichung (24) die Relation $-\mu+m -q +\mu-m=0$ erfüllt sein muß. Die Beziehung gilt nur für $q=0$. Ist $q=0$, dann ist die Bedingung $-\mu+m -q +\mu-m =0$ nicht erfüllt. Damit sind die Wignerschen $3j$ -Symbole Null⁶⁹. Wir können nun das mittlere Potential (23) nach dem im Kapitel VIII.1 beschriebenen Verfahren zur Lösung der Zweizentren-Hartree-Diracgleichung verwenden. Um eine genügende Genauigkeit der Wellenfunktionen zu erhalten, müßten wir mit drei bis vier Iterationsschritten rechnen, d.h., pro Zweizentrenabstand sind die gekoppelten radialen Differentialgleichungen vier bis fünf mal zu lösen. Verwenden wir die 21 niedrigsten κ und $\bar{\kappa}$ Niveaus, so müssen wir zur Berechnung des mittleren Potentials für jedes i -te Elektron über 42 Zustände $(\pm\kappa, \pm\bar{\kappa})$ summieren. Nehmen wir zur unteren Abschätzung der benötigten Computerzeit vier Iterations-

schritte an, so benötigen wir allein zur Lösung der gekoppelten radialen Differentialgleichungen (Gl.II.8) für einen Zweizentrenabstand R, wenn wir pro Wellenfunktion 6 Entwicklungsterme verwenden und 21 Zustände berechnen (Gl.II.41) (Computer: IBM 3032, IBM 3168):

$$T = 4.21.2,5.2^{(6-1)} \text{ sec} \quad 1 \text{ Std. } 52 \text{ min. (für Punktkerne)}$$

$$T = 4.21.3,5.2^{(6-1)} \text{ sec} \quad 2 \text{ Std. } 36 \text{ min. (für ausgedehnte Kerne).}$$

Ein weiterer Kommentar erübrigt sich.

IX. Zusammenfassung und Ausblick

Ausgehend von der Multipolentwicklung der relativistischen Zweizentrenwellenfunktionen haben wir das numerische Integrationsverfahren zur Lösung der ZweizentrenDiracgleichung vorgestellt. Die quasimolekularen Energieniveaus der gebundenen Zustände wurden sowohl im Felde zweier Punktkerne als auch im Felde zweier ausgedehnter Kerne für die symmetrischen Quasimoleküle Pb-Pb und Nb-Nb und für die asymmetrischen Quasimoleküle Pb-Cm, U-Cm, Pb-Cf und U-Cf berechnet. Die exakten Zweizentrenlösungen sind mit den Ergebnissen der Monopolnäherung verglichen worden. Die verbotenen Niveaure Kreuzungen in den Energiekorrelationsdiagrammen wurden ausführlich behandelt. Wir untersuchten die Quantenzahlen der Zweizentrensysteme und bestimmten die Phase der molekularen Wellenfunktionen, die wir zur Klassifikation der adiabatischen Zustände benötigen. Für verschiedene superschwere Quasimoleküle wurde der kritische Zweizentrenabstand angegeben.

Zum weiteren Studium symmetrischer und asymmetrischer Zweizentrensysteme gehörte die Berechnung der Dichteverteilung der Elektronen und die Untersuchung der radialen Komponenten der quasimolekularen Wellenfunktion in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand.

Grundlagen aller theoretischen Berechnungen der K-, L-Schalenionisation, der quasimolekularen Röntgenspektren, der Anisotropie, der δ -Elektronen und der Positronenerzeugung in Schwerionenstößen sind die radialen Matrixelemente und die Rotationsmatrixelemente, die wir für die Pb-Cm, U-Cm, Pb-Pb und Nb-Nb Systeme berechnet haben. Es wurde auf den Einfluß der Translationseffekte bei den radialen Matrixelementen hingewiesen.

Die $\frac{\partial}{\partial R}$ Matrixelemente in Monopolnäherung wurden mit den exakten Zweizentrenlösungen verglichen. Zum Abschluß wurde ein Hartree-Verfahren zur Lösung der Zweizentren-diracgleichung für Vielelektronensysteme angegeben und das mittlere Potential nach Multipolen entwickelt.

Die in dieser Arbeit berechneten Kopplungsmatrixelemente und Zweizentrenenergien lieferten bei der Berechnung der K-Locherzeugung Wahrscheinlichkeiten, die bei Zentralstößen bis 10% betragen können^{44-47, 10, 39, 49-54}. Für höhere Schalen sind sie noch größer.

Diese Vorhersagen wurden experimentell bestätigt^{19, 48}.

Dies ist ein Erfolg des relativistischen quasimolekularen Modells, wenn wir uns an die Ergebnisse der nichtrelativistischen Modelle $P(0) \sim 10^{-5}$ erinnern⁸⁵.

In der Zukunft sind weitere detailliertere dynamische Rechnungen mit den in dieser Arbeit berechneten Matrixelementen durchzuführen. In diesem Zusammenhang ist es wichtig, den Einfluß des Vielelektronenproblems auf die Eigenwerte und Matrixelemente und der verbotenen Kreuzungen auf die dynamischen Rechnungen besser zu kennen. Weitere intensivere Studien werden schließlich zur Lösung der Zweizentrendiracgleichung für beide Kontinua führen und damit wird dem fundamentalen Test der Quantenelektrodynamik starker Felder von theoretischer Seite nichts mehr im Wege stehen.

Literaturverzeichnis

1. G.T.Seaborg; Ann.Aw.Nucl.Sci, 18, (1968)
G.N.Flerov and I.Zvara; Science J. 7, 63 (1968)
2. J.M.Eisenberg and W.Greiner, Nuclear Theory Vol.3,
North-Holland Publishing Company, Amsterdam 1976
p.403 ff. und weitere Literatur darin.
3. G.Hermann, Proceedings of the International
Symposium on Superheavy Elements, Lubbock, Texas,
1978 (Pergamon, New York, 1978) p.24 und weitere
Literatur darin.
N.Trautmann, G.Hermann, P.Peuser, G.Tittel, M.Zendel,
H.Gäggeler, H.Ahrens, W.Brüchle, J.V.Kratz, M.Schädel,
G.Wirth, Jahresbericht 1978, GSI-79-11, S.70
und weitere Literatur darin.
T.Lund, R.Brandt, H.Jungclas, D.Molzahn und
P.Vater; Jahresbericht 1978, GSI-79-11, S.72
4. W.Pieper und W. Greiner; Z.f.Phys., 218, 327 (1969)
5. B.Müller, J.Rafelski and W.Greiner, Z.f.Physik
257, 62 (1972)
B.Müller, J.Rafelski and W.Greiner, Nuovo Cimento
18A, 551 (1973)
J.Rafelski, B.Müller and W.Greiner, Nucl.Phys.
B38, 585 (1974)
6. B.Müller, H.Peitz, J.Rafelski and W.Greiner,
Phys.Rev.Letters 28, 1235 (1972)

7. S.S.Gershtein and Y.B.Zeldovich, Soviet Phys.JETP 30, 358 (1970)
V.S.Popov, Soviet Phys. JETP 32, 526 (1971)
V.B.Zeldovich and V.S.Popov, Soviet Phys. Uspekhi 14, 673 (1972)
8. G.Soff, B.Müller and J.Rafelski; Z.Naturforsch. 29a, 1267 (1974)
9. J.Rafelski, L.P.Fulcher and W.Greiner; Phys.Rev.Lett 27, 958 (1971)
10. W.Betz, G.Heiligenthal, B.Müller, V.Oberacker, J.Reinhardt, W.Schäfer, G.Soff and W.Greiner, Int.Summer School of Nucl.Phys. Predeal, Romania 1976 in Heavy Ion Physics 1977, p.1, ed.V.Ceausescu, I.A.Dorobantu
11. G.Soff, J.Reinhardt, B.Müller and W.Greiner Phys.Rev.Lett. 38, 592 (1977)
12. H.Peitz, B.Müller, J.Rafelski and W. Greiner Lett.Nuovo Cim. 8, 37 (1973)
13. S.S.Gershtein and V.S.Popov, Lett.Nuovo Cim. 6, 593 (1973)
V.S.Popov; Sov.Phys. JETP 38, 18 (1974)
V.S.Popov; Sov.J.Nucl.Phys. 19, 81 (1974)
M.S.Marinov and V.S.Popov, Sov.J.Nucl.Phys.20, 641 (1975)
14. J.Reinhardt, V.Oberacker, B.Müller, W.Greiner and G.Soff, Phys.Lett. 78B, 183 (1978)
J.Reinhardt, B.Müller and W.Greiner in: Coherence and Correlation in Atomic Collisions (H.Kleinpoppen, ed.)

15. J.Reinhardt, Dissertation, Universität Frankfurt (1979)
16. H.Backe, L.Handschug, F.Hessberger, E.Kankeleit,
L.Richter, F.Weik, R.Willwater, H.Bokemeyer,
P.Vincent, Y.Nakayama and J.S.Greenberg;
Phys.Rev.Lett. 40, 1443 (1978)
17. C.Kozhuharov, P.Kienle, E.Berdermann, H.Bokemeyer,
J.S.Greenberg, Y.Nakayama, P.Vincent, H.Backe,
L.Handschug and E.Kankeleit
Phys.Rev.Lett. 42, 376 (1979)
18. H.Bokemeyer: Atomic Physics with Very Heavy Ions,
Heavy Ion Physics, Proceedings, Predeal 1978,
p.489, Editors:V.Ceaucescu, I.A.Dorobantu, A.Berinde
19. R.Anholt and W.E.Meyerhof: Phys.Lett 64A, 381 (1978)
20. H.Backe, W.Bonin, W.Engelhardt, E.Kankeleit,
M.Mutterer, P.Senger, F.Weik, R.Willwater, V.Metag
and J.B.Wilhelmy
Positron Production in Heavy Ion Collisions
preprint, 1979
21. V.Oberacker, G.Soff and W.Greiner
Phys.Rev.Lett. 36, 1024 (1976)
22. J.Reinhardt, G.Soff and W.Greiner
Z.f.Phys. A276, 258 (1976)
23. H.W.Schnopper, H.D.Betz, J.P.Delvaille, K.Kalata,
A.R.Sohval, K.W.Jones and H.E.Wegener; Phys.Rev.
Lett. 29, 898 (1972)

- P.Kienle, M.Kleber, B.Povh, R.M.Diamond, F.S.Stephens,
E.Grosse, M.R.Maier and D.Proetel: Phys.Rev.Lett.31,
1099 (1973)
24. G.Kraft, P.H.Mokler and H.J.Stein, Phys.Rev.Lett. 33,
476 (1974)
25. B.Müller, R.K.Smith and W.Greiner; Phys.Lett.49B,
219 (1974)
B.Müller and W.Greiner; Phys.Rev.Lett. 33, 469 (1974)
26. W.Betz, G.Heiligenthal, J.Reinhardt, R.K.Smith and
W.Greiner. The Physics of Electronic and Atomic
Collisions, ed. J.S.Risley, R.Geballe, p.531
Seattle: Univ.Wash.Press 1975
27. J.Kirsch, Dissertation, Universität Frankfurt, 1980
28. J.S.Greenberg, C.K.Davis, P.Vincent,
Phys.Rev.Lett. 33, 473 (1974)
29. Ch.Stoller, W.Wölfli, G.Bonani, M.Stöckli and
M.Suter; J.Phys.B10, L347 (1977)
W.Wölfli, E.Morenzoni, Ch.Stoller, G.Bonani and
M.Stöckli, Phys.Lett.68a, 217 (1978)
Ch.Stoller, W.Wölfli, G.Bonani, E.Morenzoni and
M.Stöckli, Z.f.Phys. A287, 33 (1978)
30. J.R.Mac Donald, M.D.Brown and T.Chiao
Phys.Rev.Lett.30, 471 (1973)
F.W.Saris, W.F.van der Weg, H.Tawara, R.Laubert
Phys.Rev.Lett.28, 717 (1972)
P.Mokler, H.J.Stein, P.Armbruster, Phys.Rev.Lett.29,
827 (1972); Phys.Rev.Lett.33, 475 (1974)

31. W.E.Meyerhof, T.K.Saylor, S.M.Lazarus, W.A.Little, B.B.Triplett and L.F.Chasw; Phys.Rev.Lett.30, 1279 (1973)
C.K.Davis and J.S.Greenberg; Phys.Rev.Lett.32, 1215 (1974)
P.Gippner, K.-H.Kaun, F.Stary, W.Schulz and Yu.P.Tretyakov, Nucl.Phys. A230, 509 (1974)
K.O.Groneveld, B.Knaf, G.Presser; Proc.Int.Conf. on Reactions between Complex Nuclei; Nashville, Tenn., June 1974, vol.1, p.133, North-Holland Publ. Comp., Amsterdam; Jahresbericht (1974) p.86, Institut f.Kernphysik, Frankfurt 1974.
W.Wölfli, Ch.Stoller, G.Bonani, H.Suter and M.Stöckli; Lett.Nuovo Cimento 14, 577 (1975)
32. H.Schmidt-Böcking, I.Tserruya, R.Schulé, R.Schuch and K.Bethge; Nucl.Instrum.Meth.132, 489 (1976)
I.Tserruya, H.Schmidt-Böcking, R.Schulé, K.Bethge, R.Schuch, H.J.Specht; Phys.Rev.Lett.36, 1451 (1976)
33. R.K.Smith, B.Müller and W.Greiner; J.Phys. B8, 75 (1975)
34. V.Oberacker and G.Soff, Z.Naturforsch.A32, 1465 (1977)
35. J.Rafelski, B.Müller and W.Greiner; Lett.Nuovo Cimento 4, 469 (1972)
36. W.Schäfer and G.Soff, Nuovo Cimento B31, 250 (1976)
37. W.Schäfer, V.Oberacker and G.Soff; Nucl.Phys.A272; 493 (1976)
38. J.Rafelski, Phys.Rev. C13, 2086 (1976)

39. G.Soff, W.Betz, G.Heiligenthal, J.Kirsch, B.Müller,
J.Reinhardt and W.Greiner; Fizika 9, 721 (1977)
Suppl. 4
40. G.Soff, J.Reinhardt, W.Betz and J.Rafelski;
Phys.Scr.17, 417 (1978)
41. B. Müller, J.Rafelski and W.Greiner; Phys.Lett.B47,
5 (1973)
B.Müller, Dissertation, Universität Frankfurt (1973)
B.Müller and W.Greiner; Z.f.Naturforsch.A31, 1, (1976)
42. J.Rafelski, B.Müller, Phys.Rev.Lett.36, 517 (1976)
43. W.Betz, Diplomarbeit, Universität Frankfurt 1976
44. W.Betz, W.Greiner, M.Gros, B.Müller, J.Reinhardt
Proc.Int.Conf.Inner-Shell Ioniz.Phenom.
2nd.ed.W.Mehlhorn, R.Brenn, p.79 Freiburg, Germany,
Univ.Freiburg 1976
45. W.Betz, G.Soff, B.Müller and W.Greiner, Phys.Rev.Lett.37,
1046 (1976)
46. W.Betz, W.Greiner, G.Heiligenthal, J.Kirsch, B.Müller,
J.Rafelski and G.Soff
Abstr.f.the Int.Conf.on the Physics of Electrons and
Atomic Collisions 10th, p.154, Paris, 1977
47. G.Soff, W.Betz, B.Müller, W.Greiner and E.Merzbacher,
Phys.Lett. 65A, 19 (1978)

48. J.S.Greenberg, H.Bokemeyer, H.Emling, E.Grosse,
D.Schwalm and F.Bosch; Phys.Rev.Lett.39, 1404 (1977)
J.R.Mc.Donald, P.Armbruster, H.H.Behncke,
F.Folkmann, S.Hagmann, D.Liesen, P.H.Mokler and
A.Warczak, Z.f.Phys.A284, 57 (1978)
H.H.Behncke, D.Liesen, S.Hagmann, P.H.Mokler and
P.Armbruster, Z.f.Phys.A288, 35 (1978)
R.Anhold, W.E.Meyerhof and Ch.Stoller,
Z.f.Phys.A291, 287 (1979)
D.Liesen, P.Armbruster, F.Bosch, S.Hagmann,
P.H.Mokler, H.J.Wollersheim, H.Schmidt-Böcking,
R.Schuch and J.B.Wilhelmy; Phys.Rev.Lett.44, 983 (1980)
49. B.Müller, G.Soff, W.Greiner, V.Ceauşescu
Z.f.Phys.A285, 27 (1978)
G.Soff, B.Müller, W.Greiner; Phys.Rev.Lett.40, 540 (1978)
50. G.Soff, W.Greiner, W.Betz and B.Müller;
Phys.Rev.A20, 169 (1979)
51. G.Soff, W.Betz, J.Kirsch, V.Oberacker, J.Reinhardt,
K.H.Wietschorke, B.Müller and W.Greiner
Heavy Ion Physics, Proceedings, Predeal International
School, Romania 1978, Editors:V.Ceauşescu, I.A.Dorobantu,
A.Berlinde.
52. J.Reinhardt, B.Müller, W.Greiner and G.Soff
Phys.Rev.Lett.43, 1307 (1979)
G.Soff, J.Reinhardt, B.Müller and W.Greiner
Z.f.Phys.A294, 137-147 (1980)
53. G.Soff, J.Reinhardt, W.Betz, J.Kirsch, K.H.Wietschorke,
V.Oberacker, B.Müller and W.Greiner;

Proc.of the 11th Int.Conf.on Physics of Electronic
and Atomic Collisions,p.696, Kyoto, Japan, 1979
G.Soff, J.Reinhardt, W.Betz, J.Kirsch, B.Müller
and W.Greiner:

Abstracts of invited and contributed papers, The VI-th
International Seminar on Ion-Atom-Collisions, p.69,
Tokai-mura, Japan 1979

54. J.Reinhardt, W.Betz, J.Kirsch, B.Müller, W.Greiner
and G.Soff: "The Present Status of Quantumelectro-
dynamics of Strong Fields", Proc.of XII Summer School
of Nuclear Physics, Mikolajki, Poland, 1979

55. G.Heiligenthal, W.Betz, G.Soff, B.Müller and W.Greiner,
Z.f.Phys. A285, 105 (1978)

56. J.Kirsch, W.Betz, J.Reinhardt, G.Soff, B.Müller and
W.Greiner, Phys.Lett. 72B, 298 (1977)
J.Kirsch, W.Betz, B.Müller, W.Greiner and G.Soff

Proc.of the XVII Int.Winter Meeting on Nuclear
Physics in Bormio, p.95, Italy, 1979

J.Kirsch, W.Betz, B.Müller, J.Reinhardt and G.Soff
Abstracts of invited and contributed papers,
The VI-th International Seminar on Ion-Atom Collisions,
p.79, Tokai-mura, Japan, 1979

J.Kirsch, W.Betz, J.Reinhardt, B.Müller, W.Greiner,
G.Soff; Z.f.Phys. A 292, 227 (1979)

57. H.Peitz, J.Kirsch, W.Betz, B.Müller, W.Greiner
Proc.of the XVIII Int.Winter Meeting on Nuclear
Physics in Bormio, p.741, Italy 1980

58. G.Soff, B.Müller, W.Greiner; "Delta-electron spectroscopy of superheavy quasiatoms. Proc.Predeal Int.School, Heavy Ion Physics, 1978, Bucharest, Romania, (eds.) A.Berinde, V.Ceaucescu, I.A.Dorobantu, p.931
59. J.Reinhardt, W.Betz, P.Gärtner, J.Kirsch, U.Müller, T.de Reus, K.H.Wietschorke, G.Soff, B.Müller and W.Greiner; "Strong Electric Fields of Superheavy Quasimolecules: Proc.of the Int.Conf. on Extreme States in Nuclear Systems, Dresden, GDR, 1980
J.Reinhardt, W.Betz, P.Gärtner, J.Kirsch, U.Müller, T.de Reus, K.H.Wietschorke, B.Müller, W.Greiner and G.Soff; "Positron Production, Inner-Shell Vacancy Formation and Delta-Electron Emission in Collisions of Very Heavy Ions" Proc.of the XVIII Winter School of Physics, Bielsko-Biata, Poland, 1980
60. J.Reinhardt, B.Müller, W.Greiner, G.Soff
Z.f.Phys.A292, 211 (1979)
61. G.Soff, Habilitation, Universität Frankfurt, 1980
62. B.Müller; Ann.Rev.Nucl.Sci 26, 351 (1976)
J.Reinhardt, W.Greiner; Rep.Prog.Phys.40, 219 (1977)
W.E.Meyerhof, K.Taulbjerg; Ann.Rev.Nucl.Sci.27, 279 (1977)
J.Rafelski, L.P.Fulcher and A.Klein; Phys.Rep.38C, 227 (1978)
S.J.Brodsky and P.J.Mohr in:
Structure and Collisions of Ions and Atoms,
ed.I.A.Sellin, Berlin, Heidelberg, New York,
Springer, 1978, p.3

63. W.E.Meyerhof, Science, 193, 839 (1976)
J.Reinhardt und W.Greiner, Physik in unserer Zeit, 7, 171 (1976)
W.Greiner und H.Peitz, Physik in unserer Zeit, 9, 165 (1978)
L.P.Fulcher, J.Rafelski and A.Klein, Scientific American 241, 150 (1979),
in deutsch: Spektrum der Wissenschaft, Febr.1980, p.39
U.Müller, W.Betz, P.Gärtner, J.Reinhardt, G.Soff,
B.Müller, W.Greiner und J.Kirsch
"Quantenelektrodynamik überkritischer Felder"
wird veröffentlicht in Phys.Blätter 1980
64. E.M.Rose, Relativistische Elektronentheorie I, II
Bibliographisches Institut Mannheim, 1971
65. M.Abramowitz and I.A.Stegun; Handbook of
Mathematical Functions, Dover Publications, Inc.,
New York 1970
66. E.Gross, Dissertation, Universität Frankfurt, 1980
67. J.D.Jackson, Classical Electrodynamics, J.Wiley and
Sons, Inc., New York, 1962
68. H.Peitz, Diplomarbeit, Universität Frankfurt, 1977
69. A.S.Dawydow, Quantenmechanik, VEB Deutscher Verlag
der Wissenschaften, Berlin, 1972
70. Die $3d\sigma$, $3d\pi$ und $3d\delta$ Zustände des Nb-Nb-Quasimoleküls
hat D.Margetan (Frankfurt 1979) berechnet. Für das
Überlassen der Energiewerte und der mit diesen Zu-
ständen berechneten Matrixelemente, möchte ich mich
recht herzlich bedanken.

71. L.P.Fulcher and A.Klein, Phys.Rev. D8, 2455 (1973)
72. V.I.Lisin, M.S.Marinov and V.S.Popov
Phys.Lett. 69B, 141 (1977); 91B, 20 (1980)
73. A.R.Edmonds, Drehimpulse in der Quantenmechanik,
Bibliographisches Institut, Mannheim, 1964
74. D.R.Bates, R.Mac Carroll, Proc.Roy.Soc. A245, 175 (1958)
75. E.R.Davison, Physical Chemistry, An Advanced Treatise,
Vol.III, Edited by D.Henderson, Academic Press,
New York, 1969
76. Es wurde ein Integrationsprogramm von U.Heinz
verwendet, siehe auch U.Heinz, Dissertation,
Frankfurt, 1980
77. D.R.Bates and D.A.Williams, Proc.Phys.Soc.Lond.
83, 425 (1964)
78. S.B.Schneiderman and A.Russek, Phys.Rev. 181, 311 (1969)
79. H.Levy II, and W.R.Thorson, Phys.Rev. 181, 244 (1969)
H.Levy II, and W.R.Thorson, Phys.Rev. 181, 252 (1969)
W.R.Thorson and J.B.Delos, Phys.Rev. A18; 135 (1978)
W.R.Thorson and J.B.Delos, Phys.Rev. A18, 117 (1978)
80. U.Heinz, Dissertation, Universität Frankfurt, 1980
U.Heinz, W.Greiner and B.Müller, UFTP 7/80 preprint
Universität Frankfurt 1980, "Electron Translation
Effects in Heavy Ion Scattering."
81. T.H.Rihan, N.S.Aly, E.Merzbacher, B.Müller and
W.Greiner; Z.f.Phys. A285, 397 (1978)

82. J.C.Slater, Phys.Rev. 81, 385 (1951)
83. R.Latter, Phys.Rev. 99, 510 (1955)
84. D.R.Hartree, Proc.Cambridge philos. Soc.24, 111(1928)
85. W.E.Meyerhof; Phys.Rev.A10, 1005 (1974)
D.Burch, W.B.Ingalls, H.Wiemann and R.Vandenbosch;
Phys.Rev.A10, 1254 (1974)
S.Foster, T.Hoogkamer, P.Woerlee and F.W.Saris,
J.Phys.B9, 1943 (1976)

Lebenslauf

Am 26. Februar 1953 wurde ich als Sohn des Schreiners Wilhelm Betz und seiner Ehefrau Marie Ernestine in Hanau am Main geboren. Von Ostern 1959 bis Ostern 1963 besuchte ich die Volksschule in Langenselbold. Anschließend wechselte ich zur Realschule in Langenselbold, an der ich im Juli 1968 das Zeugnis der Mittleren Reife erhielt. Zwischen September 1968 und Juni 1971 war ich Schüler der Grimmelshausen-Schule in Gelnhausen, die ich mit der Allgemeinen Hochschulreife verließ. Im Wintersemester 1971/72 begann ich das Studium der Physik, Mathematik und Chemie an der Johann Wolfgang Goethe-Universität in Frankfurt am Main. Im Juli 1973 legte ich die Diplom-Vorprüfung für Physiker ab. Im Oktober 1976 bestand ich die Diplom-Hauptprüfung in Physik mit der Note sehr gut. Seitdem bin ich als wissenschaftlicher Angestellter am Institut für Theoretische Physik tätig.

Meine akademischen Lehrer waren:

Prof. Dr. W. Bauer, Prof. Dr. F. Constantinescu,
Prof. Dr. M. Czerny, Dr. A. Doiwa,
Prof. Dr. U. Gerhardt, Prof. Dr. W. Greiner,
Prof. Dr. H. Hartmann, Prof. Dr. H. Haug,
Prof. Dr. K. Hensen, Prof. Dr. K.-H. König,
Prof. Dr. W. Martienssen, Prof. Dr. G. Mauck,
Prof. Dr. E. Merzbacher, Prof. Dr. E. Mohler,
Prof. Dr. B. Müller, Prof. Dr. K.-H. Müller,
Prof. Dr. A. Münster, Prof. Dr. H. Müser,
Prof. Dr. F. Rauch, Prof. Dr. M. Reichert,
Prof. Dr. A. Schaarschmidt, Prof. Dr. W. Scheid,
Dr. U.E. Schröder, Prof. Dr. Ch. Toepffer.

Danksagung

Ich danke meinen Eltern, daß sie mir das Physikstudium ermöglicht haben. Ihr Verständnis für meine Arbeit und ihre Geduld förderten den Werdegang dieser Dissertation.

Mein Dank gilt meinem Doktorvater, Herrn Prof. Dr. Walter Greiner, der diese Arbeit anregte und ihre Ausführung durch seine Anteilnahme unterstützte.

Weiterhin gilt mein Dank Herrn Prof. Dr. Berndt Müller für viele wertvolle Bemerkungen und anregende Diskussionen.

Ich danke den Herren Prof. Dr. Berndt Müller und Prof. Dr. Johann Rafelski, daß sie mir ihren Computercode zur Lösung der Zweizentrendiracgleichung für die Weiterentwicklung zur Verfügung stellten.

Die enge Zusammenarbeit in der Schwerionenatomphysikgruppe am Institut für Theoretische Physik mit den Herren Dr. Joachim Reinhardt, Dr. Gerhard Soff, Dr. Ulrich Heinz, Dr. Nour Elsayed Aly, Dr. Johannes Kirsch, Heinrich Peitz und Frau Debbie Margetan ist hervorzuheben.

Meinen Freunden und ehemaligen Kollegen im Institut für Theoretische Physik der Universität Frankfurt am Main, den Herren Dr. Jürgen Hofmann, Dr. Volker Oberacker, Dr. Wolfgang Schäfer, Dr. Horst Stöcker und Frau Dr. Angelika Müller danke ich für die langjährige freundschaftliche Zusammenarbeit.

Mein besonderer Dank gilt Frau B. Utschig, die bei den kniffligen Zeichnungen für die zahlreichen Veröffentlichungen und für diese Arbeit stets einen Rat wußte und die Bilder sorgfältig zeichnete. Einige Zeichnungen wurden von Frl. G. Roth angefertigt. Für den sauberen Druck der Dissertation sei Herrn W. Brose gedankt.

Ich danke Frau Regina Hofmann für das Schreiben und die geschickte Einteilung meiner Arbeit.

Die benötigte Rechenzeit stellte die Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt zur Verfügung.

